

Darstellung und Analyse hydrologischer Topologien auf der Basis künstlicher neuronaler Netze

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt dem Rat der Chemisch-Geowissenschaftlichen Fakultät
der Friedrich-Schiller-Universität Jena
von Dipl.-Inf. Sven Kralisch
geboren am 9. Oktober 1973 in Brandenburg an der Havel

Gutachter:

1. Prof. Dr. Wolfgang-Albert Flügel
2. Prof. Dr. Clemens Beckstein
3. Prof. Dr. Volker Hochschild

Tag der öffentlichen Verteidigung: 17. November 2004

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit am Lehrstuhl für Geoinformatik, Geohydrologie und Modellierung des Instituts für Geografie der Friedrich-Schiller-Universität Jena. Ihren Ausgangspunkt bildete hierbei das Forschungsprojekt *Integriertes Wasserwirtschaftliches Entscheidungsunterstützungssystem (IWES)*, welches vom Leiter des Lehrstuhls, Herrn Prof. Dr. Wolfgang-Albert Flügel, maßgeblich initiiert und in Kooperation mit der Thüringer Talsperrenverwaltung durchgeführt wurde. Für die Bereitstellung dieser interessanten Forschungsaufgabe sowie einer hervorragenden Arbeitsumgebung möchte ich ihm herzlich danken.

Den Anstoß für meine Mitarbeit am Projekt IWES lieferte Prof. Dr. Clemens Beckstein, der mich für diese interdisziplinäre Aufgabenstellung in einem für mich neuen wissenschaftlichen Umfeld begeisterte. Ihm gilt mein besonderer Dank, da er mir bei inhaltlichen Fragen stets zur Seite stand. Seine intensive Betreuung und die anregenden Diskussionen haben viel zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Bei Manfred Fink, der gemeinsam mit mir das Projekt IWES bearbeitete, bedanke ich mich für die Unterstützung bei allen geografischen Fragestellungen und die freundschaftliche Zusammenarbeit. Der intensive Gedankenaustausch mit ihm half mir, mich innerhalb kurzer Zeit mit der Thematik der hydrologischen Modellierung und der Geodatenverarbeitung vertraut zu machen und beeinflusste diese Arbeit in vielerlei Hinsicht. Ebenso möchte ich mich bei den Mitarbeitern der Thüringer Talsperrenverwaltung – Petra Ditsche, Frank Lotz und Roland Mauden – für die angenehme Kooperation bedanken.

Darüber hinaus danke ich allen Mitarbeitern des Lehrstuhls für die offene und freundschaftliche Atmosphäre. Carsten Busch und Olaf David hatten stets ein offenes Ohr, wenn es darum ging, Probleme der Softwareentwicklung und Datenverarbeitung zu erörtern. Rainer Hoffmann war immer zur Stelle, wenn es galt, Probleme technischer Natur zu lösen. Ramona Benkenstein und Peter Krause danke ich zudem für die formelle und inhaltliche Durchsicht des Manuskriptes.

Mein ganz besonderer Dank gilt schließlich meiner Frau Dana und meinen Söhnen, die durch ihre liebevolle Unterstützung und ihr Verständnis die Entstehung dieser Arbeit erst möglich machten.

Jena im Juli 2004
Sven Kralisch

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Problemstellung	1
1.2	Stand der Forschung	4
1.2.1	Hydrologische Modellierung	4
1.2.1.1	Klassifikation von Einzugsgebietsmodellen	5
1.2.1.2	Stickstofftransportmodellierung	7
1.2.1.3	Szenarienentwicklung	7
1.2.2	Multikriterielle Optimierungsprobleme	8
1.2.3	Entscheidungsunterstützungssysteme	10
1.2.4	Künstliche neuronale Netze	14
1.3	Forschungsbedarf	15
1.4	Zielsetzung und Thesen der Arbeit	16
1.5	Methodisches Vorgehen	19
2	Problemanalyse und Lösungsentwicklung	21
2.1	Multikriterielle Optimierung	21
2.2	Problembeschreibung	24
2.2.1	Allgemeine Definitionen	24
2.2.2	Entscheidungsvariablen	26
2.2.3	Constraints	27
2.2.4	Zielfunktionen	27
2.2.5	Stickstoffkonfigurationsproblem	28
2.3	Existierende Lösungsansätze	29
2.4	Künstliche neuronale Netze	33
2.4.1	Statische Eigenschaften	34
2.4.1.1	Netzwerkstruktur	34
2.4.1.2	Neuronen	34
2.4.2	Dynamische Eigenschaften	37
2.4.3	Lernen	37
2.5	Backpropagation-Netze	38
2.5.1	Statische Eigenschaften	38
2.5.2	Dynamische Eigenschaften	40
2.5.3	Das Backpropagation-Lernverfahren	40

2.5.3.1	Gradientenabstieg	41
2.5.3.2	Fehlerweiterleitung	44
2.5.3.3	Durchführung von Backpropagation	44
2.6	Vom Einzugsgebiet zum Backpropagation-Netz	46
2.6.1	Aufbau des Netzwerkes	46
2.6.1.1	Neuronen	46
2.6.1.2	Netzwerkstruktur	47
2.6.1.3	Aktivierungsfunktionen	47
2.6.1.4	Kantengewichte	49
2.6.1.5	Das HydroNet	49
2.6.2	Dynamische Eigenschaften	51
2.7	Ein neuronaler Lösungsansatz für das Stickstoffkonfigurationsproblem	52
2.7.1	Ein Lernverfahren für das HydroNet	53
2.7.2	Eigenschaften des Lernverfahrens	57
2.8	Praktische Überlegungen zum HydroNet	61
2.8.1	Neuronen, Netzwerkstruktur und Kantengewichte	62
2.8.2	Aktivierungsfunktionen	62
2.8.2.1	Polylines	63
2.8.2.2	Polynome	64
2.8.2.3	Gegenüberstellung	66
3	Anwendung: Das Talsperrensystem Weida-Zeulenroda	69
3.1	Charakterisierung des Einzugsgebietes	70
3.1.1	Geografische Einordnung	70
3.1.2	Lithologische und pedologische Verhältnisse	70
3.1.3	Klima	72
3.1.4	Hydrologie	72
3.1.5	Landnutzung	74
3.2	Die Simulationssoftware WASMOD	74
3.2.1	Modellbeschreibung	75
3.2.2	Modellierungsergebnisse	78
3.3	Definition von Landnutzungsszenarien	78
3.3.1	Betrachtungszeitraum	80
3.3.2	Landnutzung	80
3.3.3	Düngung	83
3.4	Vom Stofftransportmodell zum HydroNet	83
3.4.1	Räumliche Modelleinheiten und Neuronen	84
3.4.2	Gebietstopologie und Netzwerkstruktur	86
3.4.3	Aktivierungsfunktionen	87
3.4.4	Kantengewichte	88
3.4.5	Schnittstellen zwischen WASMOD und HydroNet	90
3.5	Simulation des Ist-Szenarios mit dem HydroNet	91
3.6	Optimierung mit dem HydroNet	94

3.6.1	Optimierung des Stickstoffaustrags	94
3.6.2	Validierung	101
3.6.2.1	Validierung der Ergebnisse	101
3.6.2.2	Einfluss des Klimas	103
3.6.3	Vergleich mit herkömmlichen Ansätzen	104
3.6.4	Anwendung im Gesamtgebiet	110
3.7	Praktische Umsetzung der entwickelten Verfahren	112
3.7.1	Implementierung	112
3.7.2	Anwendung zur Entscheidungsunterstützung	115
4	Zusammenfassung und Ausblick	121
4.1	Zusammenfassung	121
4.2	Ausblick	124

Abbildungsverzeichnis

2.1	Zielraum eines MOP mit möglichen Beziehungen zwischen Entscheidungsvektoren und Darstellung der Pareto-Front für das gleiche Problem	23
2.2	Ziellräume für die Teilprobleme NCP_A und NCP_B	30
2.3	Bearbeitungseinheiten mit lateralen Stoffflüssen im Raum und als Graph	33
2.4	Aufbau eines Feedforward-Netzes mit einer inneren Schicht und seine Kommunikation mit der Umgebung	35
2.5	Berechnung von Netzeingabe net_u und Aktivierung a_u eines Neurons u ohne Berücksichtigung von aktuellem Zustand und externer Eingabe	36
2.6	Klassifikation von Lernaufgaben	38
2.7	Sigmoide Aktivierungsfunktion	39
2.8	Fehlerfunktion mit lokalem und globalem Minimum	43
2.9	Idealisierte Darstellung der N-Austragsfunktion r_s einer räumlichen Einheit s	48
2.10	Interflow-, Dünge- und Grundwasserkanten in einem HydroNet	50
2.11	Lineare Interpolation und polynomiale Regression zweiter Ordnung über Stützstellen einer N-Austragsfunktion	65
3.1	Lage des Einzugsgebietes	71
3.2	Schematisches Blockbild zur Tektonik und Landschaftsform im östlichen Thüringer Schiefergebirge	71
3.3	Böden im Untersuchungsgebiet	73
3.4	Durchschnittliche Winter- und Sommerniederschläge im Untersuchungsgebiet	73
3.5	Modellierte Teilprozesse zum Kohlenstoff- und Stickstoffhaushalt	76
3.6	Flächenhafte Darstellung von N-Eingabe und N-Entzug der Simulation des Ist-Szenarios für das Jahr 2000 mit Stickstoffeintrag über Düngung und atmosphärische Deposition, Stickstoffgesamtaustrag über das Wasser, Stickstoffaustrag über Interflow sowie Stickstoffaustrag über Drän und Grundwasser	79
3.7	Gegenüberstellung der Auswirkungen von N-Reduktionen über Zeiträume von 5 Jahren und 10 Jahren	81
3.8	Beispielhafte Variation der Fruchtarten auf drei Modelleinheiten während einer fünfjährigen Modellierung	82
3.9	Überlagerung verschiedener Informationsebenen zur KGG-Ableitung	85
3.10	Datenvorverarbeitung für die Modellierung mit WASMOD	86
3.11	Mittlere Ein- und Austräge von Stickstoff für die Szenarien T_0, \dots, T_{120}	89

3.12	Durchschnittliche Anteile von Stickstoff in Interflow und Grundwasserabfluss für die Szenarien T_0, \dots, T_{120}	89
3.13	Ermittlung der Eingaben $\overline{T}_0, \dots, \overline{T}_{120}$ für das HydroNet aus fünfjährigen Fruchtfolgen	91
3.14	Gegenüberstellung der durch WASMOD berechneten KGG-Austräge und der Aktivierungen der Neuronen im HydroNet	93
3.15	Durchschnittliche Schrittweite und Differenz zwischen tatsächlicher und vorgegebener Netzwerkausgabe während der Anwendung des BP_A^* -Algorithmus	95
3.16	Ergebnisse des BP_A^* -Algorithmus bei Reduktion des ursprünglichen N-Gesamtaustrags in den Vorfluter um 25 % und 20 %	97
3.17	Gegenüberstellung der Ergebnisse des BP_A^* -Algorithmus bei Reduktionen des ursprünglichen N-Gesamtaustrags um 25 % und 20 %	98
3.18	Aktivierungsfunktion und Stützstelle (markiert), die vom monoton steigenden Verlauf abweicht	99
3.19	Anteile (Häufigkeiten) der Düngekantengewichte an verschiedenen Ergebnisklassen des BP_A^* -Algorithmus bei Reduktionen um 25 % und 20 %	100
3.20	Anteile (Flächen) der Düngekantengewichte an verschiedenen Ergebnisklassen des BP_A^* -Algorithmus bei Reduktionen um 25 % und 20 %	101
3.21	Durch WASMOD berechnete Reduktionen der N-Gesamtausträge auf der Basis von Ergebnissen des BP_A^* -Algorithmus für Reduktionen um 20 % und 25 %	102
3.22	Vergleich der Ergebnisse des BP_B^* -Algorithmus mit denen einer proportionalen und einer gleichverteilten Reduktion der N-Einträge	108
3.23	Durch WASMOD und HydroNet ermittelte N-Gesamtausträge für den Fall einer gleichverteilten Reduktion der N-Einträge	109
3.24	Ergebnisse der Anwendung des BP_A^* -Algorithmus auf das Gesamtgebiet für räumliche Modelleinheiten und landwirtschaftliche Nutzflächen	111
3.25	UML-Klassendiagramm der Basisklassen für die Implementierung des HydroNet	114
3.26	Startbildschirm des Entscheidungsunterstützungssystems IWES	116
3.27	Grafische Oberflächen zum Zugriff auf WASMOD und HydroNet	116
3.28	Dialogfenster zur Parametrisierung von HydroNet und BP^* -Verfahren	117
3.29	GIS-Client zur Auswertung der Netzwerk-Ergebnisse	119

Tabellenverzeichnis

3.1	Anteile im Gebiet vorhandener Bodenklassen nach den Leitbodenformen Thüringens	72
3.2	Flächenanteile der landwirtschaftlichen Feldfrüchte (Daten Thüringer Talsperrenverwaltung)	74
3.3	Liste der berücksichtigten Einzelprozesse	77
3.4	Fruchtfolge für das ausgewählte Landnutzungsszenario	81
3.5	Bestimmtheitsmaße für die Anwendung des BP_A^* -Algorithmus auf unterschiedliche Netzwerke	104
3.6	Reduktionen der N-Austräge für die Szenarien R_{10} , R_{20} und R_{30} auf Basis einer gleichverteilten Reduktion der N-Einträge	106
3.7	Reduktionen der N-Austräge für die Szenarien R_{10} , R_{20} und R_{30} auf Basis einer proportionalen Reduktion der N-Einträge	106
3.8	Durch den BP_B^* -Algorithmus berechnete Reduktionen der N-Gesamteinträge $z_K(\mathbf{w}^N)$ und -austräge $\Delta a_{u_{out}}$ für die Szenarien R_{10} , R_{20} und R_{30}	108
3.9	Klasseneinteilung der N-Reduktionen für Nutzflächen im Gesamtgebiet	112

1 Einführung

„Of all the social and natural crises we humans face, the water crisis is the one that lies at the heart of our survival and that of our planet Earth.“

(UNESCO-Direktor Koïchiro Matsuura anlässlich des Internationalen Jahres des Süßwassers 2003)

1.1 Problemstellung

In den letzten Jahrzehnten sind die Auswirkungen anthropogener Umweltbelastungen verstärkt in das Bewusstsein der Allgemeinheit gerückt. Bestehende ökologische Probleme erfordern ein Umdenken im Umgang mit den natürlichen Ressourcen der Erde und deren nachhaltige Bewirtschaftung, um auch zukünftigen Generationen eine vergleichbare Lebensqualität wie die der heutigen Generation zu ermöglichen. Die Beschlüsse der Konferenzen in Rio (United Nations 1992) und Johannesburg (United Nations 2002) in den Jahren 1992 und 2002 legen hierfür die Rahmenbedingungen fest. Die Agenda 21 fordert in Kapitel 18 insbesondere auch den sorgsamen Umgang mit der Ressource Wasser als eine der Grundvoraussetzungen des Lebens. Auf dem dort formulierten Ziel der nachhaltigen Nutzung der Süßwasserressourcen basiert auch die UN Millennium Declaration, in der sich die internationale Gemeinschaft unter anderem verpflichtet:

„... to stop the unsustainable exploitation of water resources, by developing water management strategies at the regional, national and local levels, which promote both equitable access and adequate supplies.“ (United Nations 2000)

Um die Aufmerksamkeit auf die Sicherung der Lebensgrundlage Süßwasser weiter zu erhöhen, initiierten UN und UNESCO in Zusammenarbeit das Internationale Jahr des Süßwassers 2003, das eine Vielzahl von Aktivitäten auf der ganzen Welt auslöste. Anlässlich des World Water Days am 22. März 2003 in Kyoto, Japan wurde der Report „Water for People, Water for Life“ (UNESCO 2003) vorgestellt, der sowohl Fortschritte bezüglich des Zieles einer nachhaltigen Entwicklung in diesem Bereich dokumentiert als auch bestehende Schwachpunkte aufzeigt. In diesem Report ist die Bedeutung der Problematik klar formuliert:

„The 21st century is the century in which the overriding problem is one of water quality and management.“ (UNESCO 2003)

Zur Beurteilung der Qualität von Süßwasserressourcen existieren Regelwerke wie z. B. die Wasser-rahmenrichtlinie der EU (Europäische Union 2000), die unter anderem Gütekriterien für den Zu-

stand aquatischer Ökosysteme und des Grundwassers definiert. In grundwasserarmen Regionen steht die Einhaltung dieser Regeln jedoch häufig in Konflikt mit einer intensiven anthropogenen Nutzung von Trinkwasserreservoirs und den dazugehörigen Einzugsgebieten. Dicht besiedelte oder landwirtschaftlich intensiv genutzte Gebiete mindern durch den Eintrag von Schadstoffen sowohl den ökologischen als auch ökonomischen Wert des Wassers. Dies kann so weit führen, dass das biologische Gleichgewicht des zugehörigen aquatischen Systems durch übermäßigen Nährstoffeintrag gestört oder gar zerstört wird. Die verschiedenen Nutzungsinteressen müssen daher sorgfältig gegeneinander abgewogen werden, um den Schutz der Wasserressourcen konsequent und effektiv zu gestalten. Ein nachhaltiges Management der Süßwasserressourcen stellt sich demnach als äußerst komplexes Problem dar. Es erfordert eine ausgewogene Balance zwischen der Berücksichtigung von Anforderungen an die Wasserqualität auf der einen und der Bewirtschaftung der zugehörigen Einzugsgebiete auf der anderen Seite. Die Ausweisung von Wasserschutzgebieten hat sich als praktikable aber kostenintensive Möglichkeit erwiesen, derartige Konflikte zu verringern. Im Rahmen des Managements solcher Einzugsgebiete sind Entscheidungsträger jedoch angehalten, die Kosten, die für die Realisierung verschiedener Szenarien der Bewirtschaftung des Gebietes anfallen, zu minimieren (ökonomisches Interesse) und dennoch eine Wasserqualität sicherzustellen, die festgeschriebenen Rahmenbedingungen genügt (ökonomische und ökologische Interessen).

Für die Bearbeitung und Lösung derartiger Probleme müssen die verfügbaren Ressourcen in Umfang und Qualität erfasst sowie Bewirtschaftungsalternativen gesucht und hinsichtlich ihrer Auswirkungen bewertet werden. Grundlage einer realitätsnahen Abbildung sowohl natürlicher als auch anthropogener Verhältnisse ist die Verarbeitung detaillierter Informationen und die Darstellung komplexer Zusammenhänge im betrachteten hydrologischen Einzugsgebiet. Hierbei leisten hydrologische Modelle einen bedeutenden Beitrag (Singh 1995). Immer komplexer werdende Fragestellungen erfordern dabei über die Abbildung des hydrologischen Prozessgeschehens hinaus oft auch die Berücksichtigung biologischer und ökologischer Aspekte (Reiche 1995, Staudenrausch 2001). Die aus der Modellierung abgeleiteten Ergebnisse dienen dabei nicht allein der Zustandsbeschreibung des simulierten Systems. Sie liefern auch wichtige Grundlagen für ein erweitertes Verständnis der zugrunde liegenden hydrologischen Prozesse und deren Auswirkung auf das betrachtete Ökosystem.

Sollen Bewirtschaftungsfragestellungen mit Hilfe von Modellen bearbeitet werden, ist es häufig erforderlich, Aussagen über Einzelflächen innerhalb des betrachteten Gesamtgebietes ableiten zu können. Distributive Modelle, die eine dazu notwendige flächendifferenzierte Betrachtung erlauben, dienen daher als zentrales Werkzeug zur Abbildung der physiografischen Gegebenheiten und der relevanten Prozesse im Gebiet. Abhängig vom Betrachtungsmaßstab und den Gebietseigenschaften haben auch topologische Beziehungen zwischen den vom Modell berücksichtigten räumlich-diskreten Einheiten einen wesentlichen Einfluss auf die Dynamik der betrachteten Prozesse, so z. B. auf laterale Transportprozesse in der Bodenzone. Viele moderne hydrologische Modelle berücksichtigen diese Beziehungen daher, um die aus ihnen resultierende Beeinflussung des Abflussgeschehens nachbilden zu können.

In vielen Fällen der Bearbeitung von Bewirtschaftungsproblemen ist es zudem notwendig, die Prozesse innerhalb einer räumlichen Einheit hinsichtlich ihrer Einflüsse auf das Gesamtsystem im Sinne einer Sensitivitätsanalyse zu bewerten. Erst dadurch wird es möglich, aus der Vielzahl potenzieller Be-

wirtschaftungsalternativen eine optimale auszuwählen, die beispielsweise einen angestrebten Zustand mit minimalem Aufwand herstellt. Ein zur Ausweisung von Wasserschutzgebieten alternativer Ansatz beinhaltet daher die Konzentration von Maßnahmen auf Teilgebiete, durch deren Nutzung einen größtmöglichen Einfluss auf die Wasserqualität ausgeübt wird. Die Suche nach besonders sensiblen Teilflächen ist dabei eine wesentliche Voraussetzung zur Lösung derartiger Konflikte. Solche Fragestellungen können durch hydrologische Modelle allein jedoch nicht bearbeitet werden. Sie können zwar gegebene Szenarien hinsichtlich der Erfüllung der Aufgabenstellung bewerten, nicht aber zielgerichtet nach Lösungen suchen. Ein schwerwiegendes Problem bei der Suche stellt die Berücksichtigung topologischer Beziehungen zwischen den Flächeneinheiten dar, die für eine realitätsnahe Modellierung der natürlichen Verhältnisse unabdingbar ist. Hinzu kommt bei der Bearbeitung praktischer Problemstellungen eine mitunter große Anzahl solcher Einheiten sowie ein hoher Detaillierungsgrad der modellierten Prozesse. Ein Verfahren zur Bearbeitung derartiger Problemstellungen muss daher in der Lage sein, zum einen gezielt nach optimalen Lösungsalternativen zu suchen und zum anderen topologische Beziehungen, große Datenmengen sowie detaillierte Prozessbeschreibungen zu verarbeiten.

Da, wie bereits erläutert, die Auswahl der Maßnahmen zur Erhöhung der Wasserqualität in der Praxis immer unter Berücksichtigung wirtschaftlicher Gesichtspunkte erfolgt, müssen die Kosten zur Realisierung dieser Maßnahmen ebenfalls in die Suche mit einbezogen werden. Demnach lassen sich bei der Suche nach einem optimalen Bewirtschaftungsszenario für das Einzugsgebiet grundsätzlich zwei Problemstellungen unterscheiden:

1. Bei gegebenen Kosten soll die Wasserqualität maximiert werden.
2. Die Kosten zur Realisierung einer festgeschriebenen Wasserqualität sollen minimiert werden.

Allgemein stellt diese Problematik ein klassisches multikriterielles Optimierungsproblem mit gegenläufigen Zielsetzungen dar. Im gewählten Anwendungsfall, der die Funktionstüchtigkeit des neu entwickelten Verfahrens unter Beweis stellen soll, ist die Minimierung des anthropogenen Stickstoffeintrags in eine Talsperre in Interaktion mit den dadurch verursachten Kosten geplant. Der Eintrag von Stickstoffverbindungen in Trinkwasserreservoirs, der durch die Ausbringung von Düngern auf landwirtschaftlich genutzten Flächen im Einzugsgebiet bedingt wird, ist ein häufig anzutreffendes Problem. Einerseits wird dadurch die Wasserqualität und die Nutzbarkeit des Wassers für die Trinkwassergewinnung infolge hoher Nitratkonzentrationen gefährdet, andererseits ist eine Einschränkung der landwirtschaftlichen Nutzung aber mit finanziellen Einbußen verbunden. In diesem Fall ist es daher sinnvoll, verschiedene Maßnahmen zu untersuchen, die den Eintrag von Stickstoff steuern können. Damit lässt sich sowohl die Wasserqualität als auch die Bewirtschaftung des Einzugsgebietes als Funktion des Stickstoffeintrags in landwirtschaftlich genutzte Flächen darstellen.

Im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit steht daher die Entwicklung eines Verfahrens, welches in der Lage ist, unter Berücksichtigung topologischer Beziehungen die Sensitivitäten von Parametern und Prozessen einzelner räumlicher Einheiten in Bezug auf ein Gesamtgebiet zu bewerten. Auf dieser Grundlage können dann Szenarien identifiziert werden, die festgelegte Rahmenbedingungen hinsichtlich ökologischer und ökonomischer Kriterien erfüllen. Übergeordnetes Ziel ist es, hiermit einen Beitrag zur nachhaltigen Bewirtschaftung landwirtschaftlich genutzter Einzugsgebiete zu leisten.

1.2 Stand der Forschung

Um bereits vorhandenes Wissen in einen Kontext zum skizzierten Problemfeld setzen zu können, soll zunächst ein kurzer Überblick über verschiedene, für die Thematik relevante Arbeiten zur Darstellung hydrologischer Einzugsgebiete sowie zur Optimierung der Bewirtschaftung solcher Systeme gegeben werden. Hierbei wird im Bereich der hydrologischen Modellierung ein besonderes Augenmerk auf die Klassifikation von Einzugsgebietsmodellen, den Spezialfall der Stickstofftransportmodellierung sowie die Szenarienentwicklung gelegt, da eine fundierte hydrologische Modellierung die Grundvoraussetzung jeder erfolgreichen Optimierung von Bewirtschaftungsszenarien darstellt. Wie aufbauend auf die Ergebnisse der Modellierung weitere Entscheidungskriterien berücksichtigt werden können, wird im Abschnitt über multikriterielle Entscheidungsprobleme näher beschrieben. In diesem Kontext werden auch Entscheidungsunterstützungssysteme vorgestellt, die einen Beitrag zur Entscheidungsfindung bei unpräzisen oder gegenläufigen Zielstellungen leisten können. Den Abschluss dieses Überblicks über den aktuellen Stand der Forschung bildet der Abschnitt über künstliche neuronale Netze und speziell ihren Einsatz in der hydrologischen Modellierung. Es wird deutlich werden, dass keine der vorgestellten Modelle und Verfahren in ihrer bisherigen Form allein in der Lage sind, die im letzten Abschnitt formulierte Problemstellung in zufriedenstellender Art und Weise zu lösen.

1.2.1 Hydrologische Modellierung

Die Modellierung hat in der hydrologischen Forschung eine lange und gut dokumentierte Tradition. Sie entwickelte sich aus der Notwendigkeit heraus, unbekannte, nicht messbare hydrologische Parameter berechnen und ihre zukünftige Entwicklung prognostizieren zu können.

In den vergangenen Jahrzehnten wurden unter anderem von Green und Ampt (1911), Horton (1945), Penman (1948), Philips (1954), Richards u. a. (1956), Nash (1957), Crawford und Linsley (1966), Freeze und Harlan (1969) sowie Nash und Sutcliffe (1970) eine Vielzahl hydrologischer Modelle entwickelt, die der Abbildung der Beziehungen zwischen Niederschlag und Abfluss dienten, um etwa Fragen der Wasserverfügbarkeit zu bearbeiten. Für die Betrachtung der erweiterten Problemstellung einer nachhaltigen Bewirtschaftung unserer Ökosysteme sind diese Modelle jedoch nicht geeignet. Um so komplexe wie interdisziplinäre Fragestellungen nach der Kombination ökologischer, ökonomischer und sozialer Komponenten zu beantworten, bedurfte es sowohl einer Neuentwicklung hydrologischer Modelle selbst als auch deren Verknüpfung mit neu zu entwickelnden ökologischen oder sozioökonomischen Modellen. Derartige Vernetzungen sind nur durch integrierte Ansätze lösbar, wie sie mit Systemen zur Kopplung einzelner Prozesskomponenten und ganzer Modelle wie beispielsweise dem *Object Modelling System* (OMS) (David u. a. 2002, Kralisch u. a. 2004) realisiert werden können.

Die Bearbeitung komplexer Problemstellungen erfordert zudem leistungsfähige Rechnersysteme, die große Datenmengen verarbeiten und vielschichtige Zusammenhänge darstellen können. Seit der Entwicklung des Stanford Watershed Model Mitte der 60er Jahre (Crawford und Linsley 1966) haben sich derartige Computermodelle hydrologischer Einzugsgebiete in Komplexität und Detailliertheitsgrad rasant weiterentwickelt. Triebfedern dieser Entwicklungen waren unter anderem die zunehmende

Leistungsfähigkeit von Computern und die damit einhergehenden Fortschritte bei der Messung, Erfassung und Verwaltung hydrologischer Daten (Singh 1995). Zusammen mit der Rechenleistung stieg somit auch die Komplexität der Prozesse, die von hydrologischen Modellen berücksichtigt werden konnten.

Um die Vielzahl verschiedener Ansätze in der hydrologischen Einzugsgebietsmodellierung bewerten und bestehende Systeme einordnen zu können, soll ihre Klassifizierung im Folgenden kurz dargestellt werden.

1.2.1.1 Klassifikation von Einzugsgebietsmodellen

Zunächst können hydrologische Modelle nach der kausalen Bestimmtheit ihrer Einzelprozesse in stochastische und deterministische unterschieden werden. Viele Autoren (Singh 1995, Beven 1985, Abbott u. a. 1986a) differenzieren deterministische Modelle weiterhin nach

1. der Diskretisierung des von ihnen berücksichtigten zeitlichen und räumlichen Kontextes sowie
2. der Art der ihnen zugrunde liegenden Prozessbeschreibungen.

Sollen verschiedene Ansätze nach der Form der zeitlichen Diskretisierung unterschieden werden, so lassen sich ereignisbezogene Modelle, die die Prozesse im Einzugsgebiet für einen einzigen Zeitpunkt abbilden, von kontinuierlichen Bilanzmodellen unterscheiden, bei denen diese Abbildung in festgelegten Intervallen (Stunden, Tage, Monate) annähernd kontinuierlich erfolgt (Singh 1995).

Wird hingegen der Ansatz der räumlichen Diskretisierung des Einzugsgebietes zugrunde gelegt, kann zwischen Mittelwert-Modellen (lumped models) und distributiven Modellen unterschieden (Singh 1995) werden. Während Mittelwertmodelle die räumliche Variabilität der Gebietseigenschaften nicht erfassen können, da sie jeden der von ihnen berücksichtigten Prozesse über das Gesamtgebiet aggregieren, bieten distributive Ansätze die Möglichkeit, innerhalb eines heterogenen Einzugsgebietes einzelne, in sich homogene Teilflächen getrennt voneinander zu berücksichtigen. Als Beispiele für Mittelwert-Modelle sind das Stanford Watershed Model (Crawford und Linsley 1966) und das Sacramento Model (Burnash 1995) zu nennen, bekannte distributive Modellsysteme sind das SHE-Modell (Bathurst 1986) und das IHDM (Calver 1988).

Zur Einteilung hydrologischer Einzugsgebiete in homogene Einheiten zum Zwecke der distributiven Modellierung existieren verschiedene Ansätze. Ein häufig eingesetztes Verfahren beruht auf der Klassifikation räumlich variabler Parameter, die für einen gegebenen Modellierungszweck von besonderem Interesse sind. Die Modellierung erfolgt dann auf Teilräumen, die als Ergebnis dieser Klassifikation ausgewiesen werden. Oft wird dazu die Topografie (Gerold u. a. 1997, Bergström 1995) oder die Landnutzung (Kite und Kouwen 1992, Meijerink 1997) herangezogen. Die resultierenden Einheiten sind im Allgemeinen unregelmäßige Polygone, wodurch jedoch häufig technische Probleme bei der Darstellung der betrachteten Prozesse auftreten. Aus diesem Grund basieren viele Modelle (SHE-Modell (Abbott u. a. 1986a,b), WASIM-ETH (Schulla 1997)) auf der Zerlegung des Einzugsgebietes in gleichförmige Raster, deren Größe von Eingabedaten und Problemstellung abhängig ist.

Ein Konzept, welches einige der Vorteile von raster- und polygonbasierten Verfahren vereint, ist die räumliche Diskretisierung auf Basis so genannter *Hydrological Response Units* (HRUs) (Flügel 1995, 1996). Dabei wird das Gebiet nicht auf der Basis einzelner physiografischer Eigenschaften zerlegt, sondern auf der Grundlage von Kombinationen mehrerer solcher Merkmale (z. B. Klima, Landnutzung, Bodenparameter, Oberflächencharakteristik). Die Zerlegung in Teilflächen resultiert dabei aus Überlagerungs- und Verschneidungsoperationen auf den entsprechenden Merkmalsebenen in einem geografischen Informationssystem. Die Auswahl der zu berücksichtigenden Merkmale erfolgt in Abhängigkeit ihres Einflusses auf die zu modellierenden Prozesse nach Durchführung einer entsprechenden Systemanalyse. Im ursprünglichen Ansatz nach Flügel (1995) werden die resultierenden Einzelflächen vor der Modellierung zunächst klassifiziert, um Flächen mit ähnlichen Parameterkombinationen zusammenzufassen. Diesem Vorgehen liegt die Idee zugrunde, dass alle Flächen einer Klasse die zu modellierenden Prozesse in ähnlicher Weise beeinflussen und im Modell gleich behandelt werden können, auch wenn sie im Einzugsgebiet räumlich voneinander getrennt sind. Da HRU-basierte Ansätze somit zwar zwischen Teilflächen innerhalb des Einzugsgebietes differenzieren, diese Flächen aber nicht verortet sind, wird hier auch von semi-distributiven Verfahren gesprochen. Mit ihrer Hilfe kann der Rechenaufwand gegenüber einer individuellen Berücksichtigung aller Einzelflächen in der Praxis stark reduziert werden. Andererseits ist der HRU-Ansatz mit dem Problem behaftet, dass topologische Beziehungen zwischen den Einzelflächen (z. B. in Form lateraler Stoffflüsse) nicht oder nur eingeschränkt berücksichtigt werden können, da die Vorteile einer von der räumlichen Verteilung der Prozesse unabhängigen Modellierung dann nicht mehr gegeben sind. Solche Beziehungen haben laut Staudenrausch (2001) jedoch in reliefierten Einzugsgebieten einen mitunter großen Einfluss auf die Dynamik der berücksichtigten Prozesse. Zur Lösung dieses Problems wurde von ihm ein Verfahren entwickelt, welches die von der Topologie unabhängigen Prozesse einerseits auf der Basis von Klassen, laterale Abflussprozesse andererseits auf der Grundlage von Einzelflächen modelliert. Andere Verfahren, z. B. auf der Basis so genannter *Kleinster Gemeinsamer Geometrien* (KGG) (Reiche 1995) verzichten zugunsten der Betrachtung lateraler Transportprozesse auf eine Klassifikation und arbeiten mit Einzelflächen, müssen aber im Gegenzug einen deutlich erhöhten Rechenaufwand in Kauf nehmen.

Steht die Art der Prozessbeschreibung im Vordergrund der Klassifikation hydrologischer Modelle, so können empirische, konzeptionelle sowie physikalisch basierte Modelle voneinander unterschieden werden (Beven 1985). Die Übergänge zwischen diesen Kategorien sind fließend, die Modellbildung wird jedoch umso komplexer und datenintensiver, je mehr sie physikalischen Gesetzmäßigkeiten folgt.

Empirische, auch als Black-Box-Modelle bezeichnete, Ansätze weisen hier den geringsten Detaillierungsgrad bei der Differenzierung der berücksichtigten Einzelprozesse auf. Ihr Ziel ist die Abbildung einer Input-/Output-Beziehung mittels mathematischer Transferfunktionen (z. B. zwischen klimatischer Eingabe und hydrologischer Ausgabe), ohne die dabei zugrunde liegenden Einflussfaktoren explizit zu repräsentieren. Ein detailliertes Systemverständnis ist für die Umsetzung solcher Modelle nicht notwendig (Refsgaard 1996). Klassische Beispiele solcher Ansätze sind das *Unit Hydrograph Model* nach Sherman (1932) und die nach Nash (1957) weiterentwickelten Verfahren. Für die Umsetzung von Black-Box-Modellen wurden in den letzten Jahren auch verstärkt neuere Technologien wie genetische Algorithmen oder künstliche neuronale Netze eingesetzt (Dawson und Wilby 2001).

Physikalisch basierte Modelle verwenden zur Abbildung hydrologischer Prozesse sowohl physikalische Gesetzmäßigkeiten von Energie- und Massetransfers als auch Parameter, die physikalisch im Gelände messbar sind. Als Beispiel für physikalisch-basierte Modelle sind SHE (Bathurst 1986) und IHDM (Calver 1988) zu nennen, die auf der Einzugsgebietsskala erfolgreich validiert werden konnten. Obwohl physikalisch basierte Modelle aufgrund ihrer Datenabhängigkeit und dem damit verbundenen Problem ihrer Bereitstellung Schwachstellen aufweisen, existieren für viele Modellanwendungen wie beispielsweise die Simulation von Landnutzungs- und Klimaänderungen und deren Einflüsse auf den Wasserkreislauf eines Einzugsgebiets keinerlei Alternativen (Refsgaard 1996). Sie finden daher breite Anwendung und stehen im Fokus anhaltender Forschungsaktivitäten (Staudenrausch 2001).

Konzeptionelle Ansätze nehmen eine nicht klar definierte Zwischenstellung zwischen empirischen und physikalisch basierten Modellen ein. Sie verwenden vereinfachte Repräsentationen grundlegender hydrologischer Prozesse. Oft wird darunter auch eine Aggregation verschiedener Prozesse über ein Flächenelement verstanden (Anderson und Burt 1985). Zur Abgrenzung gegen rein empirische Modelle wird allerdings gefordert, dass die Verfahrensparameter konzeptioneller Prozessdarstellungen im Gebiet messbar sind und einer physikalischen Grundlage damit nicht völlig entbehren.

1.2.1.2 Stickstofftransportmodellierung

Bei der Modellierung von Stoffflüssen kommt neben der Darstellung der relevanten Stoffumwandlungsprozesse dem Transportmedium eine besondere Bedeutung zu. Im speziellen Fall der Stickstofftransportmodellierung, die als Anwendungsfall der Problemlösung innerhalb dieser Arbeit näher betrachtet werden soll, wirkt das Transportmedium Wasser zudem auch als Reaktionsmedium. Eine gemeinsame Betrachtung beider Komponenten ist daher unabdingbar (Fink 2004). In den letzten Jahren wurden zahlreiche Modelle entwickelt, die eine Beschreibung aller für den Wasser- und Stoffhaushalt relevanten Prozesse umfassen, ohne dabei jedoch den lateralen Stofftransport zu berücksichtigen. Beispielhaft können hier die Modelle CANDY (Franko u. a. 1997), DYNAMIT (Huwe u. a. 1997) oder HERMES (Kersebaum und Richter 1997) genannt werden. Wie Fink (2004) jedoch zeigen konnte, kommt auch bei der Stickstofftransportmodellierung der Berücksichtigung topologischer Beziehungen im Einzugsgebiet eine große Bedeutung zu. Daher existiert eine Reihe von Modellen wie WASMOD (Reiche 1991), AnnAGNPS (Bosch u. a. 2001) oder ANSWERS (Dillaha u. a. 2001, Bouraoui u. a. 2002), welche den Transport der ermittelten Stofffrachten über laterale Abflusskomponenten bis zum Vorfluter abbilden können. Mit Ausnahme von WASMOD sind diese Modelle aus rasterbezogenen Ansätzen zur Beschreibung des Oberflächenabflusses und der Erosion und den damit verbundenen Stofftransportprozessen entstanden und sind somit nicht in der Lage, Beziehungen zwischen natürlichen Teilflächen wie etwa kleinsten gemeinsamen Geometrien adäquat abzubilden.

1.2.1.3 Szenarienentwicklung

Über die Modellierung aktueller Verhältnisse im Einzugsgebiet hinaus sind die potenziellen Möglichkeiten zukünftiger Entwicklung, in Abhängigkeit von ihren Einflussfaktoren, von großer Bedeutung

für die Entscheidungsfindung (Fink 2004). Zur Beschreibung zukünftiger Entwicklungsvarianten unter vorgegebenen Änderungen relevanter Faktoren kommt daher der Betrachtung von Szenarien häufig besondere Bedeutung zu (Meyer und Tesmer 2000). Sie sind in der Regel durch die parallele Variation einer Vielzahl von Parametern gekennzeichnet (Meyer-Schönherr 1992). Für die Entwicklung derartiger Szenarien fordert Götze (1993) die Einhaltung folgender Regeln:

1. Auseinandersetzung mit dem Ist-Zustand (Systemanalyse),
2. Treffen plausibler Annahmen für Faktoren mit ungewisser zukünftiger Entwicklung,
3. Entwurf mehrerer möglicher und konsistenter Zukunftsbilder und ihrer Entwicklungspfade,
4. Verarbeitung qualitativer und quantitativer Daten,
5. Beinhaltung von Analyse-, Prognose und Syntheseelementen,
6. systematisches und nachvollziehbares Vorgehen.

Auf der Basis vielfältiger Anwendungsfälle wurde in den letzten Jahren eine Reihe von Szenarien für spezielle Anforderungen erstellt. Zu nennen sind hier beispielsweise Extremszenarien, die mögliche Grenzen einer Entwicklung aufzeigen sollen. Dem gegenüber stehen Trendszenarien, die wahrscheinliche zukünftige Entwicklungen beschreiben. Andere wiederum unterscheiden sich bezüglich ihrer zeitlichen Dynamik. Während sich die einen auf einen bestimmten Zeitpunkt beziehen, umfassen andere einen zeitlichen Ablauf (Meyer-Schönherr 1992, Gausemeier u. a. 1996). Darüber hinaus lassen sich Szenarien auch hinsichtlich ihrer Zielabhängigkeit differenzieren. Von deskriptiven Szenarien wird gesprochen, wenn diese unabhängig von den Zielvorstellungen des Entwicklers erstellt wurden, präskriptive sind an den Zielen des Anwenders ausgerichtet. Kann für ein Szenario eine Wahrscheinlichkeit seines Eintretens angegeben werden, so spricht man nach Gausemeier u. a. (1996) von Vorhersagen, anderenfalls von Prognosen.

1.2.2 Multikriterielle Optimierungsprobleme

Der Weltwasserentwicklungsbericht der Vereinten Nationen stellt an das Management unserer Wasserressourcen folgende Anforderungen:

„Wassermanagement muss unter hoch komplexen und unsicheren Bedingungen erfolgen. Die Verantwortlichen müssen ihren Aufgaben in Situationen nachkommen, die durch rasche Veränderungen gekennzeichnet sind und es oft notwendig machen, dass sie positive Veränderungen anschieben. Wegen der vielen unterschiedlichen Interessen an Wasser müssen sie konkurrierende Forderungen in Einklang bringen.“ (Deutsche UNESCO-Kommission e.V. 2003)

Die Bearbeitung von Fragestellungen der (nachhaltigen) Bewirtschaftung von Süßwasserressourcen resultiert meist in multikriteriellen Entscheidungsproblemen. Solche Probleme sind gekennzeichnet durch eine Reihe alternativer Lösungen, die eine Menge zu berücksichtigender Kriterien in unterschiedlicher Art und Weise erfüllen. Diese so genannten Erfüllungsgrade müssen für jede Lösungsalternative evaluiert und mit denen der übrigen Alternativen verglichen werden. Die Lösung von mul-

tikriteriellen Entscheidungsproblemen besteht schließlich in der Auswahl einer Lösung, die die verschiedenen, häufig gegenläufigen Ziele in einer für den Bearbeiter optimalen Weise erfüllen. Sind die Lösungsalternativen dagegen noch nicht vorgegeben, sondern gehört die Suche nach ihnen ebenfalls zur Aufgabenstellung, so spricht man allgemein von multikriteriellen Optimierungsproblemen. Diese Charakteristik trifft auf die Bearbeitung von Bewirtschaftungsfragestellungen ebenso zu wie auch auf sehr viele andere realweltliche Probleme. Bei der Lösung multikriterieller Optimierungsprobleme kann grundsätzlich zwischen zwei Aufgabenbereichen unterschieden werden: *Suche* und *Entscheidungsfindung* (Horn 1997). Die Suche beinhaltet somit die Ermittlung einer Reihe von Kandidaten, die für eine Lösung in Frage kommen. In der darauf folgenden Phase der Entscheidungsfindung muss aus der Menge der Lösungskandidaten einer als Lösung ausgewählt werden.

Sollen nun Fragestellungen der Bewirtschaftung hydrologischer Einzugsgebiete gelöst werden, treten folgende Probleme auf:

1. Der Suchraum, der aus der Menge aller möglichen Kombinationen von Bewirtschaftungsformen auf den einzelnen betrachteten räumlichen Einheiten besteht, ist im Allgemeinen sehr groß und hochgradig komplex. Zwar können in vielen Fällen große Teile des Suchraums von der Betrachtung ausgeschlossen werden, da sie vorgegebene Rahmenbedingungen (Constraints) verletzen. Dennoch ist die Anzahl der verbleibenden Lösungen häufig zu groß, um alle von ihnen zu berücksichtigen und hinsichtlich der Zielvorgaben zu evaluieren.
2. Hinzu kommt das Problem, dass bei gegenläufigen Zielen, wie sie bei Bewirtschaftungsfragestellungen sehr häufig anzutreffen sind, ein Ranking der ermittelten Lösungsalternativen nur sehr schwer automatisiert werden kann. Dies liegt vor allem darin begründet, dass sich menschliche Präferenzen oft nicht ohne weiteres formalisieren lassen.

Dennoch existieren Verfahren, die versuchen, diese Probleme zu umgehen. Bei der Suche nach Lösungsalternativen beschränken sich diese Ansätze jedoch häufig darauf, lediglich eine kleine Menge plausibler Bewirtschaftungsszenarien zu berücksichtigen.

Zur automatisierten Erzeugung dieser Szenarien werden häufig genetische Algorithmen eingesetzt (Schaffer 1985, Goldberg 1989, Vemuri und Cedeño 1996, van Veldhuizen und Lamont 2000). Grundlage dieser Verfahren ist die iterative Entwicklung einer initialen, z. B. zufällig gewählten, Menge von Lösungsalternativen hin zu einer Menge annähernd optimaler Lösungen auf der Grundlage evolutionärer Prinzipien wie Selektion, Rekombination und Mutation.

Können diese Verfahren bei großen und komplexen Suchräumen, wie sie bei kontinuierlichen Problemen häufig anzutreffen sind, sowie aufwendig zu berechnender Zielfunktionen wegen ihrer hohen zeitlichen Komplexität (Laumanns u. a. 2002) nicht eingesetzt werden, müssen die Lösungsalternativen anderweitig bestimmt werden. In solchen Fällen kommen oft menschliche Entscheidungsträger zum Einsatz, die eine Menge plausibler Szenarien, z. B. ausgehend von einem aktuellen Zustand, erstellen. Die Lösungsalternativen werden anschließend, in der Regel mit Hilfe rechnergestützter Verfahren, hinsichtlich der Zielvorgaben bewertet.

Für den Vergleich der Lösungsalternativen existieren Verfahren, welche versuchen, die Zielvorgaben mit Hilfe unterschiedlicher Methoden zu einem einzigen Ziel zu aggregieren. Dies können zum einen

klassische Ansätze sein, welche die Lösungsalternativen bezüglich der Zielvorgaben total ordnen. Beispielhaft können hier die multi-attributive Nutzentheorie (MAUT) (Rischmüller 1980) oder der Analytische Hierarchie Prozess (AHP) (Saaty 1980) genannt werden. Die so genannten Outranking-Ansätze versuchen dagegen, die verschiedenen Lösungsalternativen durch direkten Vergleich zu bewerten und schließlich partiell zu ordnen. Beispiele hierfür sind das PROMETHEE-Verfahren (Brans u. a. 1986) oder das ELECTRE-Verfahren (Roy 1978).

Voraussetzung für den Einsatz aggregierender Verfahren ist in jedem Fall eine genaue Kenntnis der Zielvorgaben. Da diese aber für viele praktische multikriterielle Entscheidungsprobleme nur vage und unpräzise formuliert werden können, muss ein Ranking der existierenden Alternativen – oft in einem iterativen Prozess – direkt durch einen oder mehrere Entscheidungsträger erfolgen.

1.2.3 Entscheidungsunterstützungssysteme

Zur Unterstützung der Lösung multikriterieller Entscheidungs- und Optimierungsprobleme werden häufig *Entscheidungsunterstützungssysteme* (Decision-Support-Systems – DSS) eingesetzt (Bonczek u. a. 1981, Sprague und Carlson 1982, Densham und Goodchild 1989, Power 2002). Der Begriff Entscheidungsunterstützungssystem deckt dabei eine ganze Reihe verschiedener Systeme, Werkzeuge und Technologien ab, deren Gemeinsamkeit darin besteht, Unterstützung bei der Lösung unstrukturierter, vage formulierter Entscheidungsprobleme zu leisten. Es wird hierbei zwischen verschiedenen Arten von Entscheidungsunterstützungssystemen unterschieden (Power 2002):

- Kommunikationsorientierte Entscheidungsunterstützungssysteme dienen der gemeinsamen Entscheidungsfindung durch eine Gruppe von Entscheidungsträgern. Als einfachste Formen sind hier webbasierte Diskussionsforen oder Mailinglisten zu nennen.
- Datenorientierte Entscheidungsunterstützungssysteme dienen dem Zugriff, der Verwaltung sowie der Auswertung meist zeitbezogener Daten, Data-Warehousing-Systeme sind ein Beispiel solcher Systeme.
- Wissensbasierte Entscheidungsunterstützungssysteme unterstützen Entscheidungsträger durch die Bereitstellung spezialisierten Wissens über die zu bearbeitende Problemdomäne. Beispielhaft können hier Data-Minig-Systeme genannt werden, die für die Suche nach verborgenen Mustern in Daten einer Datenbank eingesetzt werden können.
- Modellorientierte Entscheidungsunterstützungssysteme erlauben Zugriff, Bearbeitung und Ausführung von Modellen, deren Ergebnisse bei der Entscheidungssuche Unterstützung leisten. Diese Systeme werden z. B. eingesetzt, um aktuelle oder zu erwartende Situationen modellieren und die Auswirkungen verschiedener Entscheidungen abschätzen zu können. Derartige Systeme unterscheiden sich von datenorientierten Entscheidungsunterstützungssystemen vor allem durch eine deutlich höhere Komplexität der eingesetzten Modelle und ein geringeres Aufkommen der zu verarbeitenden Daten.

Weiterhin lassen sich dokumentenorientierte Entscheidungsunterstützungssysteme zur Dokumentenverwaltung oder webbasierte Entscheidungsunterstützungssysteme unterscheiden. Häufig können exi-

stierende Entscheidungsunterstützungssysteme mehreren der aufgeführten Typen zugeordnet werden.

Die Entwicklung von Entscheidungsunterstützungssystemen lässt sich zurückverfolgen bis in die Mitte der 60er Jahre, als Keen und Stabell erstmalig die Idee dieser Systeme als Ergebnis von Studien über organisatorische Entscheidungssuche einerseits und interaktive Rechnersysteme andererseits beschrieben (Keen und Scott-Morton 1978). Bereits in den Jahren zuvor wurden durch die Arbeiten von Simon einige allgemeine konzeptionelle Grundlagen für Prozesse der Entscheidungsfindung geschaffen (Simon 1960). Simon unterscheidet drei Phasen bei der Lösung von Entscheidungsproblemen: *Problemanalyse*, *Design* und *Auswahl* (Intelligence, Design, Choice). Während der ersten Phase werden Informationen zusammengetragen, um das Problem genau zu analysieren. Während der Design-Phase werden mögliche Lösungsalternativen entwickelt und zusammengetragen. In der letzten Phase wird schließlich aus den vorhandenen Alternativen die Zufriedenstellenste ausgewählt. Diese auch als *rationaler Ansatz* bezeichnete Strategie bildet auch heute noch die Grundlage vor allem modellbasierter Entscheidungsunterstützungssysteme. Die Phasen des Designs und der Auswahl finden ihre Entsprechung in den von Horn (1997) formulierten Teilproblemen Suche und Entscheidungsfindung.

Ausschlaggebend für die praktische Anwendung und Verbreitung von Entscheidungsunterstützungssystemen war schließlich die zunehmende Verfügbarkeit leistungsfähiger Großrechnersysteme (z. B. IBM System 360), die einen kosteneffektiven Einsatz von Entscheidungsunterstützungssystemen in großen Unternehmen erst ermöglichte (Davis 1974). Die Anwendungsfelder der ersten, modellorientierten Entscheidungsunterstützungssysteme waren dabei vor allem im Wirtschafts- und Finanzsektor angesiedelt, um dort bei der Lösung von Managementproblemen Hilfestellung zu leisten (Power 2002).

Davis, einer der Wegbereiter der darauf folgenden Phase einer vornehmlich grundlagenorientierten Erforschung von Entscheidungsunterstützungssystemen, definiert Management-Information-Systems, wie modellorientierte Entscheidungsunterstützungssysteme auch bezeichnet wurden, als „integriertes Mensch/Maschine-System zur Bereitstellung von Informationen, um die Geschäftstätigkeiten, das Management und Aufgaben der Entscheidungssuche in einer Organisation zu unterstützen“ (Davis 1974). Zwar existiert für Entscheidungsunterstützungssysteme eine Vielzahl teilweise voneinander abweichender Definitionen unterschiedlicher Autoren, dennoch lassen sich diese Systeme durch eine Reihe charakteristischer Merkmale zusammenfassen. Geoffrion (1983) zählt folgende Eigenschaften auf:

1. Ihre Aufgabe besteht in der Bearbeitung von Entscheidungsproblemen, deren Zielvorgaben nicht oder nur vage formuliert werden können.
2. Sie besitzen eine leistungsfähige, einfach zu handhabende Benutzerschnittstelle.
3. Sie gestatten es dem Benutzer, Modelle und Daten auf flexible Weise miteinander zu kombinieren.
4. Sie können mit Hilfe der Modelle eine Reihe von Lösungsalternativen generieren.
5. Sie unterstützen verschiedene Methoden zur Auswahl einer Lösung und können leicht erweitert werden, um an veränderte Anforderungen des Benutzers angepasst zu werden.

6. Sie ermöglichen interaktive und rekursive Herangehensweisen bei der Lösungssuche.

Die Grundlage für die Entwicklung wissensbasierter Entscheidungsunterstützungssysteme wurde von Bonczek u. a. (1981) geschaffen, die zeigten, wie Expertensystemtechnologien und Ansätze aus dem Bereich der künstlichen Intelligenz durch die Integration in Entscheidungsunterstützungssysteme genutzt werden können. Andere Arbeiten in den 80er Jahren beschäftigten sich mit dem allgemeinen Aufbau von Entscheidungsunterstützungssystemen (Sprague und Carlson 1982).

Mit so genannten *Gruppenentscheidungsunterstützungssystemen* (Group-Decison-Support-Systems – GDSS), einer Form von kommunikationsorientierten Entscheidungsunterstützungssystemen, entwickelte sich ebenfalls seit dem Beginn der 80er Jahre eine weitere Klasse derartiger Systeme. Diese zielen vor allem auf Entscheidungsprobleme ab, an deren Lösung mehrere Entscheidungsträger beteiligt sind (Gray 1981, Huber 1982, Turoff und Hiltz 1982).

Entscheidungsunterstützungssysteme, die Unterstützung bei der Lösung von multikriteriellen Optimierungsproblemen mit räumlichem Bezug leisten, werden häufig auch als *raumbezogene Entscheidungsunterstützungssysteme* (Spatial-Decison-Support-Systems – SDSS) bezeichnet (Densham 1991). Malczewski (1998) charakterisiert SDSS als „interaktive, rechnergestützte Systeme, die entwickelt wurden, um einen Benutzer oder eine Benutzergruppe dabei zu unterstützen, eine höhere Effektivität bei der Lösung schlecht strukturierter räumlicher Entscheidungsprobleme zu erzielen“. Zusätzlich zu den allgemeinen Eigenschaften von Entscheidungsunterstützungssystemen besitzen raumbezogene Entscheidungsunterstützungssysteme daher Schnittstellen für die Ein- und Ausgabe räumlicher Daten und weisen Funktionen zur Verarbeitung solcher Daten auf. Ihre Entwicklung hing maßgeblich mit der Notwendigkeit zusammen, existierende Geografische Informationssysteme (GIS) um Fähigkeiten zur Bearbeitung komplexer, räumlicher Entscheidungsprobleme zu erweitern.

Eines der ersten großen raumbezogenen Entscheidungsunterstützungssysteme war das in den 70er Jahren von IBM entwickelte Geodata Analysis and Display System (GADS) (Sprague und Watson 1996, Grace 1976). Seitdem wurde eine steigende Anzahl von raumbezogenen Entscheidungsunterstützungssystemen für verschiedenste Fragestellungen entwickelt und eingesetzt (Zagona u. a. 2001, Fedra und Jamieson 1996, Fedra 2002, Parsons 2002, Ostrowski 1997, Looijen u. a. 1996).

Die Frage, inwiefern geografische Informationssysteme Unterstützung bei der Lösung raumbezogener Entscheidungsprobleme leisten können, wird in der Literatur intensiv diskutiert. Während beispielsweise Power (Power 2002) diese Systeme zu den Spezialformen datenorientierter Entscheidungsunterstützungssysteme zählt, vertreten viele andere Autoren die Auffassung, dass geografische Informationssysteme einige wesentliche Eigenschaften von raumbezogenen Entscheidungsunterstützungssystemen nicht aufweisen (Densham 1991, Malczewski 1997). Hier wird hervorgehoben, dass geografische Informationssysteme im Allgemeinen nur unzureichende Fähigkeiten besitzen, Unterstützung bei der Entwicklung von Lösungsalternativen und der Auswahl einer solchen zu leisten. Die Gründe dafür sind zum einen die eingeschränkten Möglichkeiten, mit geografischen Informationssystemen zu modellieren oder diese mit Modellen zu koppeln. Zum anderen sind derartige Werkzeuge nicht in der Lage, die Zielvorgaben und somit die Bewertungskriterien des Entscheidungsträgers angemessen zu repräsentieren und bei der Entscheidungssuche zu berücksichtigen. Nach Densham (1991) müssen raumbezogene Entscheidungsunterstützungssysteme folgende Komponenten aufweisen:

1. Modellkomponenten, die durch ein entsprechendes Verwaltungssystem kontrolliert werden,
2. ein System zur Verwaltung und Analyse geografischer Daten,
3. Funktionen zur grafischen und tabellarischen Darstellung von Eingabe- und Ergebnisdaten sowie
4. Komponenten zur Verwaltung der Zielvorgaben.

Dabei werden die Punkte eins und vier im Allgemeinen nicht durch den Funktionsumfang von geografischen Informationssystemen abgedeckt. Diese realisieren daher in existierenden Anwendungen raumbezogener Entscheidungsunterstützungssysteme oft nur Komponenten zur Verwaltung und Visualisierung räumlicher Daten.

Wie dieser Aufbau exemplarisch zeigt, besitzen die wenigsten eingesetzten raumbezogenen Entscheidungsunterstützungssysteme automatisierte Verfahren zur Generierung von Lösungsalternativen. Ein häufig verwendeter Ansatz basiert stattdessen auf der Erzeugung verschiedener plausibler Modifikationen eines bestehenden Zustandes durch den oder die Entscheidungsfinder. Diese Lösungsalternativen werden anschließend durch geeignete Modellkomponenten bezüglich der Zielvorgaben bewertet. Das Verfahren wird so lange wiederholt, bis eine der Lösungsalternativen die Zielvorgaben erfüllt. Die Modellkomponenten als Werkzeug zur Darstellung der Auswirkungen möglicher Entscheidungen sind in diesem Verfahren von zentraler Bedeutung und stehen daher im Fokus auch der hydrologischen Prozessforschung. Um der Forderung nach einer flexiblen Erweiterbarkeit und Konfigurierbarkeit dieser Komponenten nachzukommen, gibt es schon seit einiger Zeit Bestrebungen, geeignete Framework-Systeme zum Zwecke ihrer Kopplung und Verwaltung zu entwickeln, beispielhaft kann hier das Object-Modelling-System genannt werden (David u. a. 2002, Kralisch u. a. 2004).

Obwohl Entscheidungsunterstützungssysteme heute für die Lösung verschiedenster planerischer und organisatorischer Aufgabenstellungen eingesetzt werden, zeigen die oft gegensätzlichen Auslegungen der Aufgaben und des Aufbaus von Entscheidungsunterstützungssystemen in der Literatur, dass diese Systeme noch immer einer einheitlichen theoretischen Grundlage entbehren. Dies zeigt auch die Bewertung der Rolle von Entscheidungsunterstützungssystemen für den Prozess der Entscheidungsfindung (Rahman 1998). Auf der einen Seite ist die Ansicht verbreitet, dass jedes rechnerbasierte System, welches in irgendeiner Form die Entscheidungsfindung unterstützt, als Entscheidungsunterstützungssystem bezeichnet werden kann (Naylor 1982). Andere Autoren (Fedra 1995, Kersten und Michalowski 1996) vertreten dagegen die Ansicht, dass bei einer strengeren Auslegung der Funktion von Entscheidungsunterstützungssystemen – nämlich der Unterstützung von Entscheidungsträgern bei der Lösung unstrukturierter Problemstellungen – nur sehr wenige Entscheidungsunterstützungssysteme als solche bezeichnet werden können. Die Ursache dafür besteht einerseits darin, dass der Großteil dieser Systeme nicht von Entscheidungsträgern, sondern von Beratern und Fachleuten verwendet wird. Andererseits existieren kaum Systeme, die (automatisiert) nach Lösungen für unstrukturierte Probleme suchen können.

1.2.4 Künstliche neuronale Netze

Künstliche neuronale Netze sind mathematische Modelle, deren Aufbau und Funktionsweise an das Nervensystem von Säugetieren angelehnt sind. Ähnlich wie ihr biologisches Vorbild sind sie in der Lage, ihre Struktur mit Hilfe von Lernverfahren anzupassen, um auf bestimmte externe Eingaben mit festgelegten Ausgaben zu reagieren. Neben der Fähigkeit zu Lernen besitzen neuronale Netze weitere Eigenschaften, die für die Lösung realweltlicher Probleme von großem Interesse sind. Dazu zählt ihre Robustheit bei der Verarbeitung fehlerbehafteter Daten ebenso wie die Tatsache, dass sich neuronale Netze aufgrund ihres Aufbaus hervorragend zur Parallelverarbeitung auf entsprechender Hardware eignen (Gallant 1993).

Das Konzept neuronaler Netze wurde bereits in den 50er Jahren von McCulloch und Pitts (1943) entwickelt. Die anschließende Entwicklung dieser Netze kann in drei Phasen unterteilt werden. Die erste Phase beinhaltete vorbereitende Arbeiten an der Entwicklung des künstlichen Neurons, bis Minsky und Papert (1969) einige limitierende Faktoren bezüglich der Fähigkeiten solcher Modelle ermittelten. Das Interesse an neuronalen Netzen ließ infolge dieser Einschränkungen zunächst nach, bis etwa ein Jahrzehnt später die zweite Phase durch die Arbeiten von Rumelhart u. a. (1986) eingeleitet wurde. Diese entwickelten mit dem Backpropagation-Verfahren eines der wichtigsten Lernverfahren zur Anpassung der Parameter neuronaler Netze. Damit war die zielgerichtete Konfiguration neuronaler Netze und somit ihre Anwendung für eine Vielzahl von Problemstellungen möglich geworden (Dawson und Wilby 2001). Die dritte Phase der Entwicklung neuronaler Netze, die etwa mit dem Beginn der 90er Jahre eingeleitet wurde, ist durch ihre Validierung und Implementierung sowie durch die Kombination mit anderen Technologien gekennzeichnet (See und Openshaw 1999).

Seit dem Anfang der 90er Jahre werden neuronale Netze auch zunehmend zur Darstellung hydrologischer Prozesse eingesetzt (Dawson und Wilby 2001), etwa zur Abbildung der Abflussdynamik eines Einzugsgebietes in Abhängigkeit von Niederschlag und anderen klimatischen Faktoren. Im überwiegenden Teil der Anwendungsfälle können sie dabei den empirischen Black-Box-Modellen zugeordnet werden, da sie zwar nach der Anpassung ihrer Parameter durch Anwendung von Lernverfahren die beobachteten Beziehungen zwischen Ein- und Ausgabe wiedergeben können, jedoch die dabei zugrunde liegenden Mechanismen keinerlei Bezug zu den in der Realität verantwortlichen Prozessen aufweisen. Mit ihrer Hilfe lassen sich daher hydrologische Prozesse auf Einzugsgebietsebene modellieren, ohne dass ein tiefgreifendes Verständnis der zugrunde liegenden physikalischen Zusammenhänge vorliegt, die die betrachteten Beziehungen abbilden. Ihre Fähigkeit, unvollständige oder mehrdeutige Daten zu verarbeiten und beliebig komplexe, auch zeitlich dynamische Input/Output-Beziehungen darzustellen, machen neuronale Netze zu einem sehr populären Modellierungswerkzeug (Maier und Dandy 1996). Zudem ist ihre Implementierung und Anwendung in den meisten Fällen mit geringerem Aufwand verbunden als der Einsatz herkömmlicher physikalischer oder konzeptioneller Modelle. Sie sind jedoch im Gegenzug aufgrund ihrer internen Interpretation der dargestellten Beziehungen nicht geeignet, einen Beitrag zum Erkenntnisgewinn über das hydrologische Prozessgeschehen zu leisten.

Obwohl neuronale Netze erst seit gut einem Jahrzehnt Anwendung in der hydrologischen Modellierung finden, konnten sie bereits für eine Reihe von Fragestellungen erfolgreich eingesetzt werden. Hauptsächlich wurden neuronale Netze hierbei zur Modellierung der Beziehung zwischen Nieder-

schlag und Abfluss (Dawson u. a. 2000, Tokar und Johnson 1999, Abrahart u. a. 1999, Smith und Eli 1995) und zur Vorhersage von Pegelständen (Campolo u. a. 1999, Zealand u. a. 1999, Dahn u. a. 1999) herangezogen. Darüber hinaus existiert eine Reihe von Anwendungsbeispielen aus dem Bereich der Hochwasservorhersage (Chang und Hwang 1999, Thirumalaiah und Deo 1998), auch in Kombination mit der Berücksichtigung von Wasserqualitätsparametern (Yang 1997). Zur Modellierung von Klimaänderungen (Poff u. a. 1996) und zur Vorhersage von Wetterdaten (Colman und Davey 1999) wurden neuronale Netze ebenfalls eingesetzt. Nicht zuletzt existieren bereits Ansätze, unter Zuhilfenahme von neuronalen Netzen Veränderungen im Stickstoff- und Kohlenstoffhaushalt mit Klimaveränderungen zu korrelieren (Clair und Ehrmann 1996).

Der auf dem Gebiet der hydrologischen Modellierung am häufigsten eingesetzte Netzwerktyp ist das Mehrschichtperzeptron (Rumelhart u. a. 1986), etwas seltener kommt auch das Radial-Basis-Function-Netzwerk (Powell 1985, Broomhead und Lowe 1988) zum Einsatz. Beide Ansätze eignen sich sehr gut, Input/Output-Beziehungen mit Hilfe einer gegebenen Menge bekannter Datensätze beliebig genau nachzubilden. In einer Vielzahl von Studien konnten erfolgreiche Anwendungen sowohl von Mehrschichtperzeptronen (Magoulas u. a. 1997, Fahlmann 1988) als auch von Radial-Basis-Function-Netzwerken (Mason u. a. 1996, Jayawardena und Fernando 1998) dokumentiert werden.

Trotz der viel versprechenden Möglichkeiten des Einsatzes von neuronalen Netzen in der hydrologischen Modellierung ist ihre Anwendung noch mit einer Reihe ungelöster Probleme behaftet. Insbesondere eine fehlende Standardisierung und damit einhergehende Schwierigkeiten stellen Anwendungsfelder für die zukünftige Forschung auf diesem Gebiet dar. Zu diesen Problemen zählen unter anderem eine unsystematische Herangehensweise bei der Auswahl von Netzwerktyp, Trainingsmethoden und Datenverarbeitungsschritten. Dies führt dazu, dass die Ergebnisse verschiedener Anwendungen neuronaler Netze nicht oder nur schlecht miteinander vergleichbar sind und Verfahrenstechniken nicht auf andere Anwendungsfälle übertragen werden können.

Neuronale Netze sind in begrenztem Umfang auch zur Lösung von Optimierungsproblemen geeignet. Ein von Nauck u. a. (1996) beschriebenes Verfahren besteht darin, die zu variierenden Parameter durch Kantengewichte eines rückgekoppelten neuronalen Netzes derart zu repräsentieren, dass die Zielfunktion des Problems genau dann optimiert wird, wenn die Fehlerfunktion des Netzes minimal ist. Besteht die Möglichkeit einer solchen Darstellung, so kann durch Anwendung geeigneter Lernverfahren (Hopfield 1982) auch das Optimum der Zielfunktion und somit eine Lösung des Optimierungsproblems ermittelt werden. Dieser Ansatz ist jedoch grundsätzlich mit dem Problem behaftet, dass das Ergebnis des Lernverfahrens je nach Beschaffenheit der Problemdomäne nur ein lokales Optimum des Problems darstellt. Darüber hinaus ist der Erfolg derartiger Ansätze grundsätzlich davon abhängig, ob für das Ursprungsproblem eine geeignete Codierung durch Netzwerkparameter derart existiert, dass entsprechende Lernverfahren erfolgreich angewandt werden können.

1.3 Forschungsbedarf

Aus der Problemstellung und der Darstellung des Standes der Forschung lässt sich ein Forschungsbedarf ableiten, der im Folgenden näher dargestellt werden soll.

Es existieren *hydrologische Modellansätze*, mit denen für den Wasser- und Stoffhaushalt relevante Prozesse flächendistributiv dargestellt werden können. Einige dieser Ansätze sind darüber hinaus in der Lage, die vor allem in reliefierten Einzugsgebieten bedeutsamen hydrologischen Topologien zwischen den zugrunde liegenden räumlichen Modelleinheiten zu berücksichtigen. Physikalisch basiert oder konzeptionell arbeitende Modelle sind zudem zur Darstellung von Szenarien geeignet, deren Auswirkungen nicht in der Realität validiert werden können. Alle diese Ansätze können jedoch nicht genutzt werden, um für vorgegebene Prozesse sensitive Eingangsparameter gezielt zu suchen. Die Ursachen dafür sind eine zumeist hohe Komplexität dieser Modelle sowie der für praktische Problemstellungen typische enorme Umfang zu berücksichtigender Parameterkombinationen.

Die Problemstellung stellt ein klassisches *multikriterielles Optimierungsproblem* mit gegenläufigen Zielen dar. Die Analyse vorhandener Ansätze zur Lösung derartiger multikriterieller Optimierungsprobleme ergab, dass zwar eine Reihe von Verfahren auf Basis genetischer Algorithmen existieren, die potenzielle Lösungskandidaten generieren können. Diese sind jedoch wegen ihrer hohen Zeitkomplexität ungeeignet, sehr große Suchräume zu durchsuchen. Dies stellt aber eine notwendige Voraussetzung zur Ermittlung optimaler Bewirtschaftungsszenarien dar.

Obwohl *künstliche neuronale Netze* eine für hydrologische Topologien nahe liegende, natürliche Repräsentation bieten, werden sie zur Darstellung hydrologischer Prozesse bisher lediglich als Black-Box-Modelle eingesetzt. Zwar existieren für neuronale Netze gut untersuchte Lernverfahren, mit denen ihre Struktur gezielt angepasst werden kann. Da den einzelnen Netzwerkbestandteilen in Black-Box-Ansätzen aber keine eigene Bedeutung zugeordnet wird, sind sie in dieser Form zur Lösung der vorliegenden Problemstellung ungeeignet.

Entscheidungsunterstützungssysteme werden vielfach zur Bearbeitung wasserwirtschaftlicher Fragestellungen als Schnittstelle zwischen Daten und Modellen einerseits sowie dem Entscheidungsträger andererseits eingesetzt. Dabei muss festgehalten werden, dass existierende Systeme zwar in der Lage sind, in der Phase der Entscheidungsfindung Hilfestellung zu leisten, indem sie gegebene Lösungsalternativen hinsichtlich verschiedener Zielvorgaben gegenüberstellen. Modellorientierte Entscheidungsunterstützungssysteme sind ein Beispiel hierfür. Gerade aber die zuvor notwendige Suche nach geeigneten, möglicherweise gar optimalen Lösungsalternativen wird insbesondere bei der Bearbeitung unstrukturierter Probleme kaum unterstützt. Die Entwicklung eines geeigneten Verfahrens zur Suche nach optimalen Lösungsalternativen ist daher Grundvoraussetzung für ein Entscheidungsunterstützungssystem, mit dem die vorliegende Problemstellung bearbeitet werden kann.

1.4 Zielsetzung und Thesen der Arbeit

Die Bewirtschaftung einer landwirtschaftlich genutzten Fläche ist von vielen, häufig unbekannten Parametern abhängig. Dazu zählen die spezifischen, physiografischen Eigenschaften der Einzelfläche oder auch individuelle Präferenzen der Bewirtschafter. Der anthropogen verursachte Stickstoffeintrag (N-Eintrag) ist jedoch aufgrund der engen Verknüpfung mit der Bewirtschaftung geeignet, hier als Leitparameter zu fungieren. Eine Konfiguration optimierter N-Einträge kann dann in Verknüpfung

mit den übrigen Parametern der realweltlichen Problemstellung zur Formulierung optimierter Bewirtschaftungsszenarien herangezogen werden.

Methodisches Ziel der Arbeit ist es daher, ein Verfahren zu entwickeln, mit dem die Ausweisung einer optimierten Konfiguration von N-Einträgen für ein hydrologisches Einzugsgebiet unter Berücksichtigung hydrologischer Topologien möglich ist. Betrachtet werden sollten dabei zum einen die N-Konzentration im Vorfluter als Maß für die Wasserqualität und zum anderen der anthropogene, vor allem durch N-Düngung verursachte N-Eintrag auf den Einzelflächen im Einzugsgebiet. Folgende Ziele waren im Einzelnen von dem Verfahren zu berücksichtigen:

1. Die N-Konzentration im Vorfluter sollte möglichst geringfügig von einem vorgegebenen, den natürlichen Zustand des Vorfluters charakterisierenden Wert abweichen. Dieses Ziel entspricht der Forderung nach einer vom N-Gehalt abhängigen Wasserqualität.
2. Die N-Einträge auf den Einzelflächen sollten in möglichst geringem Umfang von den für die jeweilige Bewirtschaftung optimalen N-Einträgen abweichen. Hiermit wird die Forderung nach einer Minimierung der für Bewirtschaftungsänderungen aufzubringenden Kosten ausgedrückt.

Ausgehend von diesen Zielen sollte die Bearbeitung folgender praktischer Problemstellungen möglich sein:

1. Bei gegebenen Kosten für Änderungen der N-Einträge auf den Einzelflächen soll der N-Gesamtaustrag in den Vorfluter minimiert werden.
2. Bei vorgegebenem N-Gesamtaustrag in den Vorfluter sollen die Kosten der dafür notwendigen Änderungen der N-Einträge auf den Einzelflächen minimiert werden.

Zur Darstellung der für den Stickstoffumsatz relevanten Prozesse sowie des Wasser- und Stofftransports im betrachteten Gebiet in Abhängigkeit von der Bewirtschaftung sollte das gesuchte Verfahren auf existierende Modelle zurückgreifen. Auch bei der räumlichen Diskretisierung des Einzugsgebietes sollte sich das Verfahren auf vorhandene Modelleinheiten und Topologieinformationen stützen, die von den zugrunde liegenden hydrologischen und Stofftransportmodellen bereitgestellt werden.

Die praktische Zielstellung der Arbeit besteht in einer softwaretechnischen Umsetzung des Verfahrens, welches damit den Kern eines Entscheidungsunterstützungssystems bilden kann. Durch seine Anwendung auf ausgewählte Aufgabenstellungen für ein vorgegebenes Einzugsgebiet soll seine Funktionsweise evaluiert und Auswirkungen verschiedener Parametrisierungen des Verfahrens am praktischen Beispiel untersucht werden. Abschließend sollen die Ergebnisse des Verfahrens mit denen alternativer Ansätze verglichen werden.

Im Einzelnen sollten durch die Entwicklung und Anwendung des Verfahrens folgende Thesen nachgewiesen werden:

1. Für die Steuerung und Verteilung von Maßnahmen, die auf eine Reduktion des aus anthropogenen Quellen stammenden diffusen N-Eintrags in einen Vorfluter abzielen, müssen die dafür verantwortlichen Prozesse im zugehörigen Einzugsgebiet in Abhängigkeit von räumlich verteilten, externen N-Einträgen abgebildet werden. Künstliche neuronale Netze sind dazu geeignet,

- a) die dabei zu berücksichtigenden Einzelflächen im Gebiet differenziert darzustellen,
- b) die für den Stoffaustrag verantwortlichen Prozesse flächendistributiv nachzubilden und
- c) den Stofftransport im Gebiet durch explizite Darstellung hydrologischer Topologien zu repräsentieren,

um somit den gesuchten N-Gesamtaustrag in den Vorfluter zu ermitteln.

2. Die Prozesse, die den N-Austrag einer Teilfläche im Gebiet in Abhängigkeit des sich aus ihrer Bewirtschaftung ergebenden N-Eintrags steuern, können durch eine lineare Interpolation auf der Grundlage von Stützstellen adäquat dargestellt werden. Diese Stützstellen müssen dabei so gewählt werden, dass sie die Bandbreite möglicher Bewirtschaftungsformen und N-Einträge in repräsentativer Weise abdecken. Sie beinhalten dann auch implizit alle übrigen Einflussgrößen, wie etwa physiografische Eigenschaften der zugehörigen Fläche. Die Ermittlung der Stützstellen erfolgt mit einem geeigneten Modell, welches die relevanten Prozesse auf der Einzelfläche darstellen kann.
3. Die Bearbeitung von Bewirtschaftungsfragestellungen erfordert vielfach die Lösung von multi-kriteriellen Optimierungsproblemen, welche die Berücksichtigung gegenläufiger Zielstellungen beinhalten. Auch die Suche nach Änderungen flächenbezogener N-Einträge zur Einhaltung vorgegebener Grenzwerte in einem zugehörigen Vorfluter ist durch diese Charakteristik geprägt, da neben ökologischen auch ökonomische Gesichtspunkte berücksichtigt werden müssen. Die Lösung derartiger Optimierungsprobleme kann mit Hilfe von Lernverfahren für künstliche neuronale Netze erfolgen. Aufgrund ihrer Fähigkeit, gezielt nach Änderungen der Netzwerkstruktur zur Sicherstellung einer vorgegebenen Netzerkaskade zu suchen, können sie bei geeigneter Problemrepräsentation die gesuchten Änderungen der N-Einträge ermitteln. Die ermittelten Änderungen können zur Lösung praxisnaher Problemstellungen verwendet werden, indem die Relevanz von Bewirtschaftungsänderungen einzelner Flächen vergleichend gegenübergestellt wird. Darüber hinaus kann das Verfahren zur Identifikation von Flächen dienen, deren Bewirtschaftung unabhängig von einer konkreten Zielvorgabe eine geringe Bedeutung für den N-Gesamtaustrag aufweist.
4. Der Einsatz künstlicher neuronaler Netze ermöglicht skalenunabhängig einerseits die Darstellung einer großen Anzahl von Einzelflächen sowie ihrer topologischen Beziehungen und andererseits einen hohen Detaillierungsgrad der Beziehung zwischen N-Eintrag und N-Austrag. Ein Optimierungsverfahren auf ihrer Grundlage kann somit für verschiedene räumliche Diskretisierungsansätze und unabhängig vom Detaillierungsgrad der Prozessdarstellung im Modell eingesetzt werden.
5. Bei der Simulation des N-Gesamtaustrags aus einem hydrologischen Einzugsgebiet kommt der Berücksichtigung topologischer Beziehungen zwischen Einzelflächen eine besondere Bedeutung zu. Im Modell wird dazu der für eine Einzelfläche ermittelte N-Austrag in angrenzende Flächen weitergegeben, um ihn dort weiteren N-Abbauprozessen zuzuführen. Das so entstehende zusätzliche N-Abbaupotenzial kann die Bedeutung einer Einzelfläche aus Sicht des Vorfluters stark beeinflussen. Die Berücksichtigung topologischer Beziehungen hat daher einen

wesentlichen Einfluss auf die Effizienz von Maßnahmen auf Einzelflächen, die zur Steuerung des N-Gesamtaustrags eingesetzt werden.

1.5 Methodisches Vorgehen

Der zuvor beschriebenen Zielstellung der Arbeit wurde sich genähert, indem in einem ersten Schritt eine orientierende Problemanalyse vorgenommen wurde. Diese beinhaltete vornehmlich eine intensive Auseinandersetzung mit vorhandenem Wissen über multikriterielle Optimierungsprobleme. Dieses wurde auf seine Anwendungsmöglichkeiten im Kontext der vorliegenden Problemstellung geprüft. Hierzu wurde ein Abgleich mit notwendigen Funktionalitäten und Randbedingungen der hydrologischen Optimierung vorgenommen. Aus der Analyse ergab sich die Notwendigkeit der Entwicklung eines neuartigen Optimierungsverfahrens.

Daraufhin wurde in einem zweiten Schritt die Möglichkeit des Einsatzes von künstlichen neuronalen Netzen geprüft, da sie geeignet schienen, die für die Problemlösung bedeutsamen lateralen Stofftransportprozesse abzubilden. Besonderes Augenmerk wurde hierbei auf Backpropagation-Netze gelegt. Diese eignen sich aufgrund ihrer individuellen Eigenschaften zur Abbildung von Einzelflächen im hydrologischen Einzugsgebiet sowie den hydrologischen Beziehungen zwischen diesen Einzelflächen. Nach einer sorgfältigen Analyse der Potenziale von Backpropagation-Netzen zur Lösungsentwicklung wurde eine Anpassung des zugehörigen Backpropagation-Lernverfahrens an die Problemstellung vorgenommen. Hieraus ergab sich ein spezielles Backpropagation-Netz und ein auf den hydrologischen Kontext ausgerichtetes Optimierungsverfahren, welche zur Bearbeitung der Ausgangsfragestellung genutzt werden konnten.

Als Voraussetzung zur praktischen Anwendung des neu entwickelten Verfahrens erfolgte seine objektorientierte Implementierung in Java. Diese schloss auch die Bereitstellung von Komponenten zur Parametrisierung sowie eine grafische Benutzeroberfläche zur Visualisierung der Ergebnisse mit ein.

Die Anwendung des Verfahrens erfolgte beispielhaft am Einzugsgebiet des Talsperrensystems Weida-Zeulenroda. Um das hydrologische Einzugsgebiet einschließlich der Stickstofftransporte und der für den Stickstoffabbau relevanten Prozesse abzubilden, wurden Daten zur räumlichen Diskretisierung, zu den topologischen Beziehungen zwischen den räumlich diskreten Einheiten sowie das Verhältnis von Stickstoffeintrag in die Fläche zum Stickstoffaustrag aus der Fläche benötigt. Zur Darstellung der individuellen Charakteristik des Einzugsgebietes wurde die hydrologische Modellierungssoftware WASMOD herangezogen (Fink 2004). Die Ergebnisse dieser Modellierung dienten hierbei sowohl als Ausgangspunkt des Optimierungsverfahrens als auch zur Validierung seiner Ergebnisse. Die Optimierung des Stickstoffeintrags im Einzugsgebiet nach vorgegebenen Parametern erfolgte unter Zuhilfenahme von Szenarien, die ausgehend vom Ist-Zustand entwickelt wurden. Der Erfolg dieser Optimierung anhand der Ausweisung einzelner sensibler Flächen mit hohem Einfluss auf das Gesamtsystem konnte durch eine Gegenüberstellung mit herkömmlichen Verfahren nachgewiesen werden. Abschließend wurde die Einbettung des entwickelten Verfahrens in ein Entscheidungsunterstützungssystem beschrieben und die Vorgehensweise bei der Anwendung des Systems durch einen menschlichen Bearbeiter dokumentiert.

2 Problemanalyse und Lösungsentwicklung

2.1 Multikriterielle Optimierung

Die Optimierung der Bewirtschaftung landwirtschaftlich genutzter hydrologischer Einzugsgebiete gehört – wie viele andere realweltliche Probleme – zur Gruppe der multikriteriellen Optimierungsprobleme.

„Ein multikriterielles Optimierungsproblem kann definiert werden als Suche nach einem Vektor von Entscheidungsvariablen, welcher einer Reihe von Constraints genügt und der eine Vektorfunktion optimiert, deren Elemente Zielfunktionen repräsentieren.“ (Osyczka 1985)

Die Entscheidungsvariablen sind dabei die Parameter, denen im Laufe der Optimierung Werte zugewiesen werden, welche dann im Erfolgsfall eine Lösung für das Optimierungsproblem repräsentieren. Die *Constraints* sind allgemeine Beschränkungen, die zur Darstellung von Abhängigkeiten zwischen verschiedenen *Entscheidungsvariablen* sowie zwischen Entscheidungsvariablen und Konstanten dienen. Die Zielfunktionen beschreiben in Abhängigkeit von den Entscheidungsvariablen eine Reihe von Zielen, die optimiert (maximiert oder minimiert) werden sollen. Da diese *Zielfunktionen* in vielen Fällen gegenläufig sind, ist mit multikriterieller *Optimierung* die Suche nach einer Lösung gemeint, die für alle Zielfunktionen akzeptable Werte liefert.

Die nun folgenden Definitionen und die Terminologien entsprechen weit verbreiteten Standardformulierungen in der Literatur über multikriterielle Optimierungsprobleme (Osyczka 1985, Zitzler 1999, Knowles 2002).

Definition 2.1.1 (Multikriterielles Optimierungsproblem)

Ein allgemeines *multikriterielles Optimierungsproblem* ist ein Tupel $MOP = (E, C, Z)$ mit

1. $E = \{v_1, \dots, v_n\}$ ist eine Menge von Entscheidungsvariablen. Wird jeder der Entscheidungsvariablen v_i ein Wert x_i zugewiesen, so heißt $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ *Entscheidungsvektor*.
2. $C = \{c_1(\mathbf{x}), \dots, c_m(\mathbf{x})\}$ ist eine Menge von Constraints.
3. $Z = \{f_1(\mathbf{x}), \dots, f_k(\mathbf{x})\}$ ist eine Menge von Zielfunktionen.

Eine Lösung dieses Problems ist ein Entscheidungsvektor $\mathbf{x}^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)$, der

1. alle Constraints erfüllt:

$$\mathbf{c}(\mathbf{x}^*) = (c_1(\mathbf{x}^*), \dots, c_m(\mathbf{x}^*)) \leq 0 \quad (2.1.1)$$

2. und die Vektorfunktion

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = (f_1(\mathbf{x}^*), \dots, f_k(\mathbf{x}^*)) \quad (2.1.2)$$

optimiert.

Unter der Optimierung einer Vektorfunktion mit den Zielfunktionen f_1, \dots, f_k ist dabei zu verstehen, dass

1. alle Zielfunktionen maximiert werden oder
2. alle Zielfunktionen minimiert werden oder
3. einige der Zielfunktionen maximiert und andere minimiert werden.

Aus Gründen der Vereinfachung werden häufig alle Zielfunktionen in eine Maximierungs- oder Minimierungsform überführt.

Weiterhin gilt:

$$(c_1(\mathbf{x}^*), \dots, c_m(\mathbf{x}^*)) \leq 0 \Leftrightarrow \forall i \in \{1, \dots, m\} : c_i(\mathbf{x}^*) \leq 0.$$

Durch die Menge der Constraints werden die Werte, die die Entscheidungsvariablen annehmen können, eingeschränkt. Die Suche nach einer Lösung kann damit auf diejenigen Entscheidungsvektoren aus X eingegrenzt werden, die keine Constraints verletzen.

Definition 2.1.2 (Entscheidungsraum, Zielraum, Suchraum)

Die Menge aller Entscheidungsvektoren

$$X = \{\mathbf{x} : \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)\} \quad (2.1.3)$$

eines MOP heißt *Entscheidungsraum*, die Menge der dazugehörigen Funktionswerte

$$Y = \{\mathbf{f}(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in X\} \quad (2.1.4)$$

wird als *Zielraum* bezeichnet. Die Elemente $y \in Y$ des Zielraums heißen *Zielvektoren*.

Der *Suchraum* (*feasible set*) X_f eines MOP ist definiert als die Menge der Entscheidungsvektoren \mathbf{x} , die keine Constraints verletzen:

$$X_f = \{\mathbf{x} \in X : \mathbf{c}(\mathbf{x}) \leq 0\}. \quad (2.1.5)$$

Analog dazu ist das Bild des Suchraumes definiert:

$$Y_f = \{\mathbf{f}(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in X_f\}. \quad (2.1.6)$$

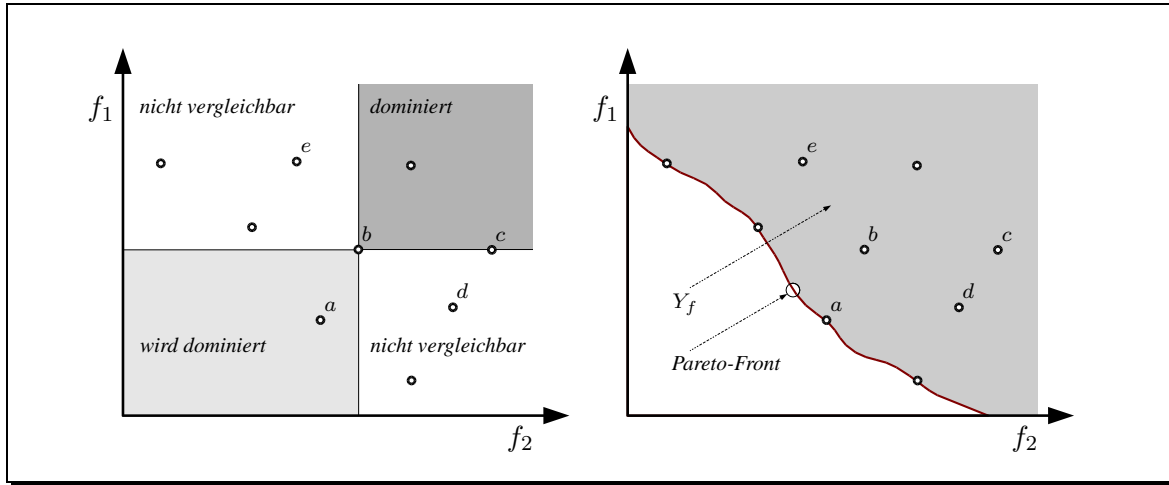


Abbildung 2.1: Zielraum eines MOP mit möglichen Beziehungen zwischen Entscheidungsvektoren (links) und Darstellung der Pareto-Front für das gleiche Problem (rechts) (Zitzler 1999)

Bei einkriteriellen Optimierungsproblemen sind die Elemente des Suchraumes bezüglich der Zielfunktion total geordnet. Für den multikriteriellen Fall ändert sich die Situation. Die Ordnungsrelation zwischen zwei Lösungskandidaten bezüglich einer der Zielfunktionen muss nicht zwangsläufig auch für Beziehungen bezüglich anderer Zielfunktionen gelten. Die Elemente in X_f sind in diesem Fall nicht mehr total, sondern nur noch partiell geordnet (Pareto 1896). Dieser Sachverhalt ist im linken Teil von Abbildung 2.1 illustriert. Dargestellt ist der Zielraum eines MOP mit den Zielen f_1 und f_2 sowie die Bilder einer Reihe von Lösungskandidaten (Entscheidungsvektoren) im Zielraum. Hier ist Lösungskandidat b zwar größer als Kandidat d bezüglich f_1 , aber kleiner als d bezüglich f_2 . Um diesen Sachverhalt zu formalisieren, wird zunächst eine partielle Ordnung auf den Zielvektoren definiert.

Definition 2.1.3

Für zwei beliebige Zielvektoren u und v gelten folgende Ordnungsrelationen:

$$\begin{aligned} u &= v && \Leftrightarrow && \forall i \in \{1, \dots, k\} : u_i = v_i \\ u &\geq v && \Leftrightarrow && \forall i \in \{1, \dots, k\} : u_i \geq v_i \\ u &> v && \Leftrightarrow && u \geq v \wedge u \neq v \end{aligned}$$

Die Relationen \leq und $<$ sind analog definiert.

Diese Relationen können nun auch auf den Suchraum übertragen werden.

Definition 2.1.4 (Pareto-Dominanz)

Für zwei beliebige Entscheidungsvektoren a und b gelten folgende Ordnungsrelationen:

$$\begin{aligned} a \succ b & \quad (a \text{ dominiert } b) & \Leftrightarrow & \quad \mathbf{f}(a) > \mathbf{f}(b) \\ a \succeq b & \quad (a \text{ überdeckt } b) & \Leftrightarrow & \quad \mathbf{f}(a) \geq \mathbf{f}(b) \\ a \sim b & \quad (a \text{ ist nicht vergleichbar mit } b) & \Leftrightarrow & \quad \mathbf{f}(a) \not\geq \mathbf{f}(b) \wedge \mathbf{f}(b) \not\geq \mathbf{f}(a) \end{aligned}$$

Die Relationen \preceq und \prec sind analog definiert.

Zur Veranschaulichung des Begriffes der Pareto-Dominanz ist im linken Teil der Abbildung 2.1 der Zielraum bezüglich eines Lösungskandidaten B in drei Teilräume untergliedert. Hervorgehoben ist die Menge aller Entscheidungsvektoren, die von B dominiert werden (*dominiert*), durch die B dominiert wird (*wird dominiert*) und die nicht vergleichbar sind mit B (*nicht vergleichbar*). Des Weiteren wird C von B überdeckt.

Auf der Grundlage der Pareto-Dominanz kann nun der Begriff der Optimalität für multikriterielle Optimierungsprobleme eingeführt werden.

Definition 2.1.5 (Pareto-Optimalität, Effizienz)

Ein Entscheidungsvektor $\mathbf{x} \in X_f$ heißt *nicht-dominiert* bezüglich einer Menge $A \subseteq X_f$ genau dann, wenn gilt:

$$\nexists \mathbf{a} \in A : \mathbf{a} \succ \mathbf{x}. \quad (2.1.7)$$

$\mathbf{x} \in X_f$ heißt *pareto-optimal*, wenn \mathbf{x} nicht-dominiert ist bezüglich X_f . Ist \mathbf{x} pareto-optimal, dann wird der dazugehörige Zielvektor $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ als *effizient* bezeichnet.

Definition 2.1.6 (Pareto-Menge, Pareto-Front)

Die Menge X^* aller pareto-optimalen Entscheidungsvektoren wird als *Pareto-Menge* bezeichnet:

$$X^* = \{\mathbf{x} : \mathbf{x} \text{ ist pareto-optimal}\}. \quad (2.1.8)$$

Die dazugehörige Menge Y^* aller effizienten Zielvektoren wird als *Pareto-Front* bezeichnet:

$$Y^* = \{\mathbf{f}(\mathbf{x}) : \mathbf{f}(\mathbf{x}) \text{ ist effizient}\}. \quad (2.1.9)$$

2.2 Problembeschreibung

2.2.1 Allgemeine Definitionen

Das Hauptziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Verfahrens, welches ein optimiertes Düngeszenario für landwirtschaftliche Nutzflächen eines hydrologisches Einzugsgebietes ermitteln kann. Die Grundlage für die Ausweisung solcher Szenarien ist allgemein eine Menge S von räumlichen Einheiten

im betrachteten Einzugsgebiet:

$$S = \{s_1, \dots, s_k\}. \quad (2.2.1)$$

Diese Einheiten können als Polygone aufgefasst werden, die durch eine Reihe von Attributen charakterisiert sind. Zu diesen Attributen zählen physiografische Merkmale (z. B. räumliche Lage, Größe, Landnutzung und Bodenparameter) ebenso wie topologische Eigenschaften, mit denen räumliche Beziehungen zwischen je zwei Einheiten dargestellt werden können.

Jede dieser räumlichen Einheiten besitzt das Potenzial, Stickstoff, der von außen in die Einheit eingetragen wird, abzubauen. Um dieses Abbaupotenzial darstellen zu können, wird eine Funktion r eingeführt, die den Stickstoffaustrag in Abhängigkeit vom externen Stickstoffeintrag beschreiben kann.

Definition 2.2.1 (N-Austragsfunktion)

Sei $s \in S$ eine räumliche Einheit und $n_s \in \mathbb{R}^+$ der Stickstoffeintrag in diese Einheit. Dann berechnet die *N-Austragsfunktion*

$$r_s : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+ \quad (2.2.2)$$

den Stickstoffaustrag der Fläche s in Abhängigkeit vom Eintrag n_s für eine festgelegte zeitliche Periode.

Die Funktion r_s berechnet den N-Austrag dabei unter folgenden Annahmen:

1. Für alle veränderlichen, physiografischen Eigenschaften von s , die den N-Austrag beeinflussen (z. B. Klima, Landnutzung), werden konstante, für s repräsentative Werte gewählt.
2. Um eine vollständige Wachstumsperiode der pflanzlichen Bedeckung der Einheit und die damit verknüpften Schwankungen des N-Abbaupotenzials in der N-Austragsfunktion zu repräsentieren, berechnet r_s den Austrag für jeweils ein Jahr.
3. Die Verteilung der Düngemittelgaben innerhalb der Jahres ist abhängig von der Landnutzung.

Der aus einer räumlichen Einheit ausgetragene gelöste Stickstoff kann über zwei verschiedene Abflusskomponenten an die Umgebung weitergegeben werden:

1. Eine vertikale Komponente, die durch Versickerung von gelöstem Stickstoff aus der Bodenzone in den Vorfluter entsteht.
2. Eine laterale Komponente, die durch den oberflächennahen Transport von Stickstoff in benachbarte Flächen charakterisiert ist.

Zur Darstellung dieser Komponenten werden zwei weitere Funktionen eingeführt:

Definition 2.2.2 (Vertikaler/lateraler Stofffluss)

Die Funktion

$$f_{vert} : S \rightarrow [0, 1] \quad (2.2.3)$$

weist jeder Einheit $s \in S$ einen Wert zwischen 0 und 1 zu, der den *vertikalen Anteil* des aus s ausgetragenen Stickstoffs bestimmt.

Die Funktion

$$f_{lat} : S \rightarrow [0, 1] \quad (2.2.4)$$

weist jeder Einheit $s \in S$ einen Wert zwischen 0 und 1 zu, der den *lateralen Anteil* des aus s ausgetragenen Stickstoffs bestimmt.

Es gilt:

$$\forall s \in S : f_{vert}(s) + f_{lat}(s) = 1. \quad (2.2.5)$$

Definition 2.2.3 (Downstream-Einheit)

Die Abbildung

$$ds : S \rightarrow S \cup \{\emptyset\} \quad (2.2.6)$$

weist jeder räumlichen Einheit $s \in S$ eine *Downstream-Einheit* $t \in S$ zu, die das Ziel des lateralen Anteils des aus s ausgetragenen Stickstoffs darstellt. Falls für s keine Downstream-Einheit existiert, liefert ds das leere Element, es gilt:

$$ds(s) = \emptyset \Rightarrow f_{lat}(s) = 0 \wedge f_{vert}(s) = 1.$$

Nach diesen allgemeinen Definitionen kann nun das vorliegende Problem der Konfiguration von Stickstoffeinträgen NCP (Nitrogen Configuration Problem) genauer beschrieben werden. Dazu werden zunächst die Entscheidungsvariablen E_{NCP} , die Constraints C_{NCP} und die Zielfunktionen Z_{NCP} definiert.

2.2.2 Entscheidungsvariablen

Von besonderem Interesse für die Aufgabenstellung ist der externe Stickstoffeintrag jeder Einheit, der im Wesentlichen von der Bewirtschaftung abhängig ist. Im Folgenden bezeichnet v_s eine Variable, die den externen Stickstoffeintrag einer Fläche $s \in S$ beinhaltet, n_s ist der Wert dieser Variablen. Damit kann nun die Menge der Entscheidungsvariablen E_{NCP} wie folgt festgelegt werden:

$$E_{NCP} = \{v_s : s \in S\}. \quad (2.2.7)$$

Ein Entscheidungsvektor $\mathbf{n} = (n_{s_1}, \dots, n_{s_k})$ repräsentiert dann ein Szenario, welches die Stickstoffeinträge auf allen k Flächen eines Einzugsgebietes beschreibt.

2.2.3 Constraints

Der Rahmen der Änderungen, die am Stickstoffeintrag der räumlichen Einheiten vorgenommen werden dürfen, wird durch ein einziges Constraint $c(\mathbf{n})$ definiert:

$$c(\mathbf{n}) = k - \sum_{s \in S} \text{sgn}(n_s). \quad (2.2.8)$$

mit

$$\text{sgn}(n_s) := \begin{cases} +1 & \text{falls } n_s \geq 0 \\ -1 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dieses soll lediglich sicherstellen, dass der Stickstoffeintrag einer Fläche keine negativen Werte annehmen kann. Damit ist die einelementige Menge der Constraints C_{NCP} wie folgt gegeben:

$$C_{NCP} = \{c(\mathbf{n})\}. \quad (2.2.9)$$

2.2.4 Zielfunktionen

Die Suche nach einer Konfiguration von Stickstoffeinträgen auf den räumlichen Einheiten des Einzugsgebietes verfolgt zwei Ziele.

1. *Ziel A:* Die N-Konzentration im Vorfluter soll möglichst geringfügig von einem vorgegebenen, den natürlichen Zustand des Vorfluters charakterisierenden Wert abweichen.
2. *Ziel B:* Die N-Einträge auf den Einzelflächen sollen in möglichst geringem Umfang von den für die jeweilige Bewirtschaftung optimalen N-Einträgen abweichen.

Beide Ziele sollen nun durch eine Zielfunktion dargestellt werden. Dazu wird zunächst definiert, wie der Stickstoffaustrag einer räumlichen Einheit $s \in S$ in Abhängigkeit von einem Entscheidungsvektor mit Hilfe der N-Austragsfunktion berechnet werden kann.

Definition 2.2.4 (N-Austrag)

Sei $s \in S$ eine räumliche Einheit und $\mathbf{n} = (n_{s_1}, \dots, n_{s_k})$ ein Entscheidungsvektor. Dann berechnet die rekursive Funktion $o : S \times \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ den *N-Austrag* aus s mit Hilfe der N-Austragsfunktion wie folgt:

$$o(s, \mathbf{n}) = r_s \left(n_s + \sum_{\{s' : ds(s')=s\}} (o(s', \mathbf{n}) f_{lat}(s')) \right). \quad (2.2.10)$$

Der N-Gesamteintrag in s setzt sich also zusammen aus einem Eintrag n_s durch Düngung sowie einer Summe von Einträgen von anderen räumlichen Einheiten im betrachteten Einzugsgebiet, die über laterale Verknüpfungen mit s in Beziehung stehen.

Da nun bekannt ist, wieviel Stickstoff bei einer gegebenen Konfiguration von Stickstoffeinträgen von den räumlichen Einheiten abgegeben wird, kann Ziel A durch eine Zielfunktion wie folgt dargestellt werden:

Definition 2.2.5 (Eintragsfunktion)

Sei $\mathbf{n} = (n_{s_1}, \dots, n_{s_k})$ ein Entscheidungsvektor, welcher die anthropogenen Stickstoffeinträge durch Düngung in alle räumlichen Einheiten $s \in S$ beschreibt. Dann ist die *Eintragsfunktion* $z_E : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ wie folgt definiert:

$$z_E(\mathbf{n}) = \sum_{s \in S} (f_{vert}(s) \cdot o(s, \mathbf{n})). \quad (2.2.11)$$

Die Eintragsfunktion berücksichtigt also nur den über die vertikale Abflusskomponente ausgetragenen Stickstoff, der über laterale Flüsse abgegebene Stickstoff entspricht gemäß Definition 2.2.4 einer Stickstoffspende an andere räumliche Einheiten. Damit wird implizit angenommen, dass keine lateralen Stoffflüsse von räumlichen Einheiten direkt in den Vorfluter existieren. Dies kann in der Praxis leicht sichergestellt werden, indem Stoffflüsse in den Vorfluter generell als vertikale Flüsse ausgewiesen werden.

Ziel B wird durch eine zweite Zielfunktion dargestellt:

Definition 2.2.6 (Kostenfunktion)

Sei $\mathbf{n} = (n_{s_1}, \dots, n_{s_k})$ ein Entscheidungsvektor, welcher die Stickstoffeinträge in alle räumlichen Einheiten $s \in S$ beschreibt. Sei weiterhin $\mathbf{n}^{opt} = (n_{s_1}^{opt}, \dots, n_{s_k}^{opt})$ ein Entscheidungsvektor, der für alle räumlichen Einheiten den für ihre Bewirtschaftung optimalen Stickstoffeintrag bestimmt. Dann ist die *Kostenfunktion* z_K wie folgt definiert:

$$z_K(\mathbf{n}) = \sum_{s \in S} |n_s - n_s^{opt}|. \quad (2.2.12)$$

Damit ist die Menge der Zielfunktionen Z_N gegeben durch:

$$Z_{NCP} = \{z_E(\mathbf{n}), z_K(\mathbf{n})\}. \quad (2.2.13)$$

2.2.5 Stickstoffkonfigurationsproblem

Mit diesen Definitionen lässt sich nun das zentrale Problem dieser Arbeit wie folgt definieren.

Definition 2.2.7 (Stickstoffkonfigurationsproblem)

Ein *Stickstoffkonfigurationsproblem* (NCP) ist ein multikriterielles Optimierungsproblem der Form:

$$NCP = (E_{NCP}, C_{NCP}, Z_{NCP}). \quad (2.2.14)$$

Die Zielfunktionen müssen dabei minimiert werden.

Entsprechend der Problemstellung in Abschnitt (1.4) kann das Stickstoffkonfigurationsproblem weiter eingegrenzt und die folgenden praktischen Problemstellungen unterschieden werden:

1. NCP_A :

Der Stickstoffeintrag z_E in den Vorfluter darf einen gegebenen Höchstwert z_E^{max} nicht überschreiten. Daher wird eine Konfiguration von Stickstoffeinträgen \mathbf{n} gesucht, die

- a) die Einhaltung dieses Höchstwertes sicherstellt:

$$z_E(\mathbf{n}) \leq z_E^{max}$$

und dabei

- b) minimale Kosten $z_K(\mathbf{n})$ zur Umsetzung hervorruft.

2. NCP_B :

Dem Entscheidungsträger steht zur Umsetzung von Änderungen des Stickstoffeintrags ein festes Budget z_K^{max} zur Verfügung. Gesucht ist eine Konfiguration von Stickstoffeinträgen \mathbf{n} , die

- a) dieses Budget ausschöpft:

$$z_K(\mathbf{n}) \leq z_K^{max}$$

und dabei

- b) die Eintragsfunktion $z_E(\mathbf{n})$ minimiert.

Ausgangspunkt für beide Problemstellungen ist dabei eine Konfiguration von für die Bewirtschaftung optimalen Stickstoffeinträgen \mathbf{n}^{opt} auf allen räumlichen Einheiten $s \in S$. Abbildung 2.2 zeigt die Zielräume von NCP_A (links) und NCP_B (rechts) zusammen mit der Pareto-Front des NCP.

Nachdem das zu lösende Problem nun eingehend beschrieben wurde, wird im folgenden Abschnitt auf mögliche Ansätze zur Lösung eingegangen.

2.3 Existierende Lösungsansätze

In Abschnitt 2.2 wurde das Problem der Suche nach einer optimalen Konfiguration von Stickstoffeinträgen auf den räumlichen Einheiten eines hydrologischen Einzugsgebietes als multikriterielles Optimierungsproblem dargestellt. Die Lösung solcher Probleme kann grundsätzlich in zwei Phasen unterteilt werden: Suche und Entscheidungsfindung (Horn 1997). In der ersten Phase wird der Entscheidungsraum nach Lösungskandidaten durchsucht. Ziel dieser Suche ist es, einen möglichst großen Teil der nicht-dominierten Entscheidungsvektoren (Pareto-Menge) zu identifizieren. In der zweiten Phase wird aus der Menge der ausgewählten Entscheidungsvektoren eine Lösung ausgewählt. Da den verschiedenen Zielen häufig keine Präferenzen zugeordnet werden können, wird diese Auswahl meist von einem menschlichen Entscheidungsträger vorgenommen. Bei der Lösung multikriterieller Optimierungsprobleme können nach Horn (1997) folgende Strategien unterschieden werden:

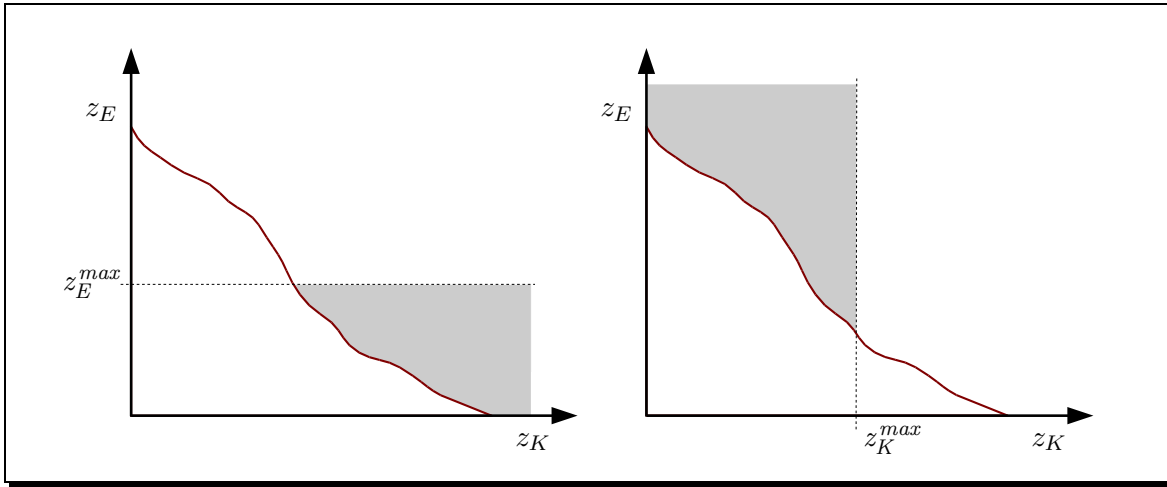


Abbildung 2.2: Zielräume für die Teilprobleme NCP_A (links) und NCP_B (rechts)

1. *Entscheidungsfindung vor der Suche*

Diese Strategie beinhaltet die Zusammenfassung der verschiedenen Ziele zu einem Gesamtziel. Diese Aggregation spiegelt die persönlichen Präferenzen des Entscheidungsträgers wider.

2. *Entscheidungsfindung nach der Suche*

Bei dieser Strategie wird der Suchraum ohne jegliche Präferenzinformationen nach nicht-dominierten Entscheidungsvektoren durchsucht. Ziel ist es, einen möglichst großen Teil der Pareto-Menge zu identifizieren. Erst im Anschluss wird durch den Entscheidungsträger einer der Entscheidungsvektoren aus der Pareto-Menge als Lösung ausgewählt.

3. *Entscheidungsfindung während der Suche*

Hierbei handelt es sich um eine interaktive Strategie, bei der der Entscheidungsträger während der Suche Präferenzinformationen bezüglich einzelner Ziele äußern kann. In einem iterativen Prozess werden dem Entscheidungsträger dazu verschiedene Entscheidungsalternativen präsentiert, durch Auswahl werden Teile des Suchraums entfernt und in dem verkleinerten Suchraum anschließend weiter gesucht. Diese Strategie kann demnach als Kombination der beiden erstgenannten betrachtet werden.

Um die Strategie *Entscheidungsfindung vor der Suche* einsetzen zu können, müssen die verschiedenen Ziele des Optimierungsproblems zu einem Ziel zusammengefasst werden. Dies geschieht mit Hilfe einer skalarwertigen Nutzenfunktion $U : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$, deren Parameter die Präferenzen eines Entscheidungsträgers darstellen. Der einfachste Fall einer solchen Funktion ist die gewichtete Summe der verschiedenen Zielfunktionen:

$$U(f_1(\mathbf{x}), \dots, f_k(\mathbf{x})) = \sum_{i=1}^k a_i f_i(\mathbf{x}). \quad (2.3.1)$$

Das so transformierte Optimierungsproblem kann anschließend mit herkömmlichen Verfahren zur Lösung von einkriteriellen Optimierungsproblemen bearbeitet werden.

(Neben anderen Formen skalarwertiger Nutzenfunktionen sind hier auch nicht-skalare Aggregationen denkbar. Ein Beispiel hierfür ist der lexikografische Ansatz, bei dem die verschiedenen Ziele vom Entscheidungsträger entsprechend ihrer Bedeutung geordnet werden.)

Allen aggregativen Ansätzen ist gemein, dass zur Bestimmung der Parameter der Nutzenfunktion eine tiefgreifende Kenntnis der Problemdomäne notwendig ist. Häufig sind dazu aber nicht in ausreichendem Umfang Informationen verfügbar. Dieses Problem stellt sich auch im Fall der Suche nach Konfigurationen von Stickstoffeinträgen, da hier die Eintragsfunktion z_E und die Kostenfunktionen z_K zu einer Nutzenfunktion zusammengefasst werden müssten.

Entsprechend der Darstellung als gewichtete Summe (2.3.1) könnte der Nutzen U wie folgt definiert werden:

$$U(z_K(\mathbf{x}), z_E(\mathbf{x})) = a_K z_K(\mathbf{x}) + a_E z_E(\mathbf{x}). \quad (2.3.2)$$

Problematisch hierbei ist die Bestimmung der Parameter a_K und a_E , da für eine Gewichtung der Einhaltung eines vorgeschriebenen maximalen Gesamteintrags in den Vorfluter gegenüber der Minimierung von Eingriffen in die Düngung auf Einzelflächen nicht in ausreichendem Maße Informationen verfügbar sind. Aus diesem Grund ist ein solcher aggregativer Ansatz für die vorliegende Problematik nicht angebracht.

Bei der Strategie der *Entscheidungsfindung nach der Suche* ist eine Gewichtung der Ziele nicht notwendig. Größtes Problem dieses Ansatzes ist eine möglichst vollständige Exploration der Pareto-Front. Da das in vielen Fällen – besonders bei Problemen mit kontinuierlichem Suchraum – nicht möglich ist, ist das Ziel der Suche eine möglichst gute Approximation der Pareto-Front bei einer gleichmäßigen Verteilung der Lösungskandidaten über die Pareto-Front.

In der Literatur finden sich eine Reihe von Verfahren zur Ermittlung von nicht-dominierten Entscheidungsvektoren. Diese Verfahren lassen sich allgemein in zwei Kategorien unterteilen, und zwar

1. klassische Verfahren auf der Basis von *Entscheidungsfindung vor der Suche* und
2. Verfahren auf der Basis evolutionärer Algorithmen.

Zu den Verfahren der ersten Kategorie gehören unter anderem die Gewichtungsmethode und die Constraintmethode (Cohon 1978). Diese Verfahren beruhen auf der Aggregation mehrerer Ziele zu einem Gesamtziel. Im Gegensatz zur *Entscheidungsfindung vor der Suche* werden die Parameter dieser Aggregation jedoch nicht von einem Entscheidungsträger bestimmt, sondern systematisch vom Suchverfahren variiert. Ziel ist es, für möglichst alle relevanten Parametrisierungen der Nutzenfunktion eine einkriterielle Optimierung durchzuführen und so die Pareto-Menge annähernd bestimmen zu können.

Verfahren auf Basis evolutionärer Algorithmen zur Lösung von multikriteriellen Optimierungsproblemen existieren seit etwa Mitte der 80er Jahre (Schaffer 1985). Ihre grundlegende Idee besteht darin, zunächst eine Menge von potenziellen Lösungskandidaten zufällig auszuwählen. Diese Menge wird dann in einem iterativen Prozess den beiden grundlegenden Mechanismen der Evolution unterworfen, nämlich der Selektion und der Variation. Dabei werden die Kandidaten zunächst bewertet und mit einem skalaren Fitnesswert versehen. Angelehnt an das Vorbild der Natur erhalten die Kandidaten

anschließend die Möglichkeit, sich zu reproduzieren. Die Anzahl der Nachfahren ist dabei abhängig von der individuellen Fitness des Kandidaten. Durch Rekombination und Mutation wird bei der Erzeugung der Nachfahren das Prinzip der Variation nachgebildet. Das Ziel von evolutionären Algorithmen besteht letztlich in der Entwicklung der initial ausgewählten Lösungskandidaten in Richtung der Pareto-Front. Abhängig von der Anzahl der initialen Kandidaten und einer geschickten Umsetzung von Selektion und Variation kann die Pareto-Front mit diesem Verfahren mehr oder weniger gut approximiert werden.

Der Vorteil klassischer Verfahren ist vor allem darin zu sehen, dass eine große Anzahl erprobter Algorithmen zur einkriteriellen Optimierung existieren, die ohne großen Aufwand übertragen werden können. Da die systematische Variation von Parametern durch das Optimierungsverfahren jedoch weitgehend blind erfolgt, sind diese Ansätze wegen ihrer hohen Komplexität insbesondere für Probleme mit großen Suchräumen nicht geeignet. Hinzu kommt, dass eine gute Annäherung der Pareto-Front mit diesen Verfahren auch dann nicht immer gewährleistet ist, wenn der resultierende hohe Aufwand in Kauf genommen wird. So kann der Erfolg klassischer Verfahren außerdem abhängig sein von der Form der Pareto-Front oder von der Verfügbarkeit weitreichender Informationen über die Problemdomäne.

Diese Nachteile weisen evolutionäre Algorithmen nicht auf. Der Vorteil dieser Verfahren liegt in ihrer hohen Robustheit und ihrer Anpassungsfähigkeit an individuelle Problemstellungen. Van Veldhuizen und Lamont (2000) stellen jedoch fest, dass die Berechnung der Fitness – und damit der Zielfunktionen – die zeitliche Komplexität evolutionärer Algorithmen für die meisten realweltlichen Probleme dominiert. Aus dieser Tatsache resultieren folgende Anforderungen an das Lösungsverfahren:

1. Die Komplexität zur Berechnung der Zielfunktionen muss möglichst gering sein.
2. Die Anzahl der Evaluationen der Zielfunktionen muss möglichst gering sein.

Die verwendete Suchstrategie in evolutionären Algorithmen hat auf die Erfüllung der ersten Anforderung keinen Einfluss. Wird allerdings die Anzahl der Evaluationen berücksichtigt, zeigt sich schnell die Schwäche dieser Verfahren bei der Lösung von Problemen mit sehr großen Suchräumen:

1. Der Mechanismus der Variation ist im Allgemeinen kaum zielgerichtet. Zwar haben Kandidaten mit schlechten Fitnesswerten geringere Möglichkeiten, Nachfahren zu erzeugen. Bis zu diesem Zeitpunkt müssen die Kandidaten aber bereits evaluiert worden sein. Um dieses Problem zu umgehen, ist eine zielgerichtete Erzeugung von Nachkommen notwendig, die überflüssige Evaluationen der Fitness verhindert.
2. Zum Zwecke einer genauen Approximation der Pareto-Front oder eines Teils der Pareto-Front ist es notwendig, eine große Anzahl von Kandidaten zu verwalten. Hinzu kommt das Problem, dass sich die Entwicklung der Kandidaten während der fortschreitenden Evolution nur schwer steuern lässt und somit eine gleichmäßige Abdeckung der Pareto-Front nicht immer gewährleistet werden kann. Zwar existieren hier Ansätze, die versuchen, dieses Problem zu umgehen (Niche-Pareto-Genetic-Algorithms, Horn (1997)), eine zielgerichtete Abdeckung vorgegebener Bereiche der Pareto-Front wäre aber wünschenswert.

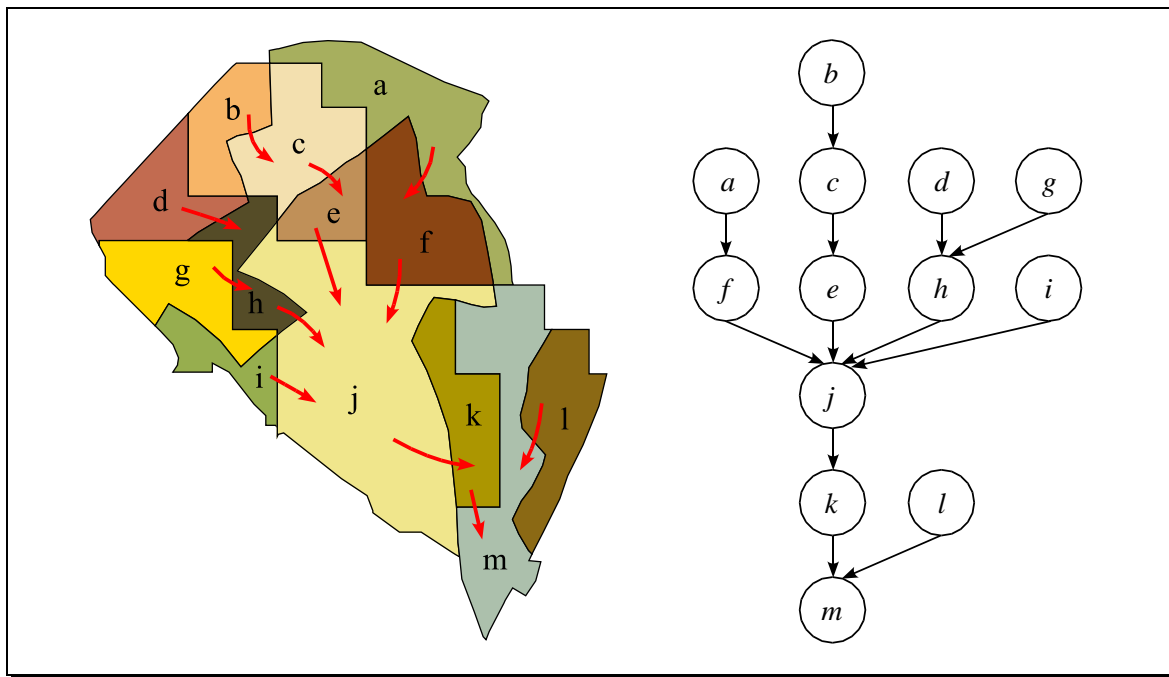


Abbildung 2.3: Verarbeitungseinheiten mit lateralen Stoffflüssen im Raum (links) und als Graph (rechts)

Aus diesen Gründen ist es notwendig, ein Optimierungsverfahren zu entwickeln, welches die genannten Anforderungen – geringer Aufwand zur Berechnung der Zielfunktion sowie eine geringe Anzahl von Evaluationen durch eine zielgerichtete Suche – erfüllt.

2.4 Künstliche neuronale Netze

Bei genauer Betrachtung des in Abschnitt 2.2 beschriebenen Problems lässt sich leicht erkennen, dass sich die räumlichen Einheiten zusammen mit den lateralen und vertikalen Stoffflüssen als gerichteter, zyklensfreier Graph darstellen lassen. Abbildung 2.3 zeigt einen solchen Graphen, der aus einer Reihe von räumlichen Einheiten und lateralen Flüssen (rote Pfeile) zwischen diesen Einheiten abgeleitet wurde. Die lateralen Flüsse verlaufen stets von einer räumlichen Einheit zur zugehörigen Downstream-Einheit.

Wird außerdem die N-Austragsfunktion der Verarbeitungseinheiten als zusätzliche Eigenschaft der Knoten repräsentiert, entsteht aus diesem Graphen mit einigen zusätzlichen Erweiterungen ein (künstliches) neuronales Netz. In den folgenden Abschnitten wird dargestellt, wie bei geeigneter Parametrisierung mit einem solchen Netz die Stickstoffaustragsfunktion des gesamten Einzugsgebietes dargestellt werden kann. Im folgenden Abschnitt erfolgt daher zunächst eine kurze Beschreibung des Aufbaus und der Funktionsweise von neuronalen Netzen. Anschließend wird dargestellt, wie sich ein NCP als neuronales Netz darstellen lässt.

Die folgenden Terminologien und Formalisierungen entsprechen weit verbreiteten Standards in der

Literatur über neuronale Netze, wie sie z. B. bei Nauck u. a. (1996) und Gallant (1993) zu finden sind.

2.4.1 Statische Eigenschaften

2.4.1.1 Netzwerkstruktur

Ein *neuronales Netz* (NN) besteht aus einer Menge von autonomen Verarbeitungseinheiten (*Neuronen*), die durch gerichtete Kommunikationspfade (*Kanten*) miteinander verbunden sind. Die Kanten dienen dem Informationsaustausch zwischen den durch sie verbundenen Neuronen. Aus diesem Grund ist jeder Kante eine Zahl (*Gewicht*) zugeordnet, welche die Stärke der Verbindung widerspiegelt und somit die Fähigkeit der Kante, Informationen weiterzuleiten. Jedes Neuron besitzt eine *Aktivierungsfunktion*, mit Hilfe derer über eingehende Kanten empfangene Signale verarbeitet werden können, bevor sie über ausgehende Kanten weitergegeben werden. Ein neuronales Netz kann aufgefasst werden als Maschine, welche eine Funktion berechnen kann, die durch eine möglicherweise sehr große Menge von Parametern (Gewichten) repräsentiert wird. Optimierung Im Allgemeinen können drei Teilmengen von Neuronen unterschieden werden:

1. *Eingabeneuronen*: Diese dienen der Kommunikation des neuronalen Netzes mit der Außenwelt und leiten Informationen im Allgemeinen ohne Verarbeitung weiter. Eingabeneuronen besitzen keine eingehenden Kanten.
2. *Ausgabeneuronen*: Wie die Eingabeneuronen stellen auch diese Neuronen nur eine Schnittstelle nach außen dar, die keine eigene Funktionalität besitzt.
3. *Innere Neuronen*: Diese Neuronen repräsentieren zusammen mit den Kanten die eigentliche Funktionalität eines neuronalen Netzes. Da diese häufig auch als Blackbox-Modelle betrachtet werden, welche nur über Ein- und Ausgabeneuronen mit der Außenwelt kommunizieren, wird auch von *versteckten Neuronen* gesprochen.

Bei neuronalen Netzen wird zwischen *Feedforward-Netzen* und *rekurrenten Netzen* unterschieden. In Feedforward-Netzen werden Signale stets zyklensfrei weitergeleitet, in rekurrenten Netzen sind solche Zyklen vorhanden. Da jedoch auch die hier betrachteten Stoffflüsse zwischen den Bearbeitungseinheiten stets zyklensfrei sind, beschränkt sich die Betrachtung im Folgenden auf Feedforward-Netze.

Aus organisatorischen Gründen werden Neuronen häufig in Schichten gruppiert. Die Neuronen innerhalb einer Schicht zeichnen sich dann dadurch aus, dass sie ausschließlich mit Neuronen der vorangegangenen oder der nachfolgenden Schicht durch Kanten verbunden sind. Entsprechend der Unterscheidung verschiedener Arten von Neuronen werden auch die Schichten in Eingabe-, Ausgabe- und innere Schichten unterteilt, Abbildung 2.4 zeigt ein Feedforward-Netz mit einer inneren Schicht.

2.4.1.2 Neuronen

Neuronen sind einfache Verarbeitungseinheiten, die in Abhängigkeit von ihrem aktuellen Zustand (ihrer *Aktivierung*) und ihrer aktuellen Eingabe eine Ausgabe berechnen können.

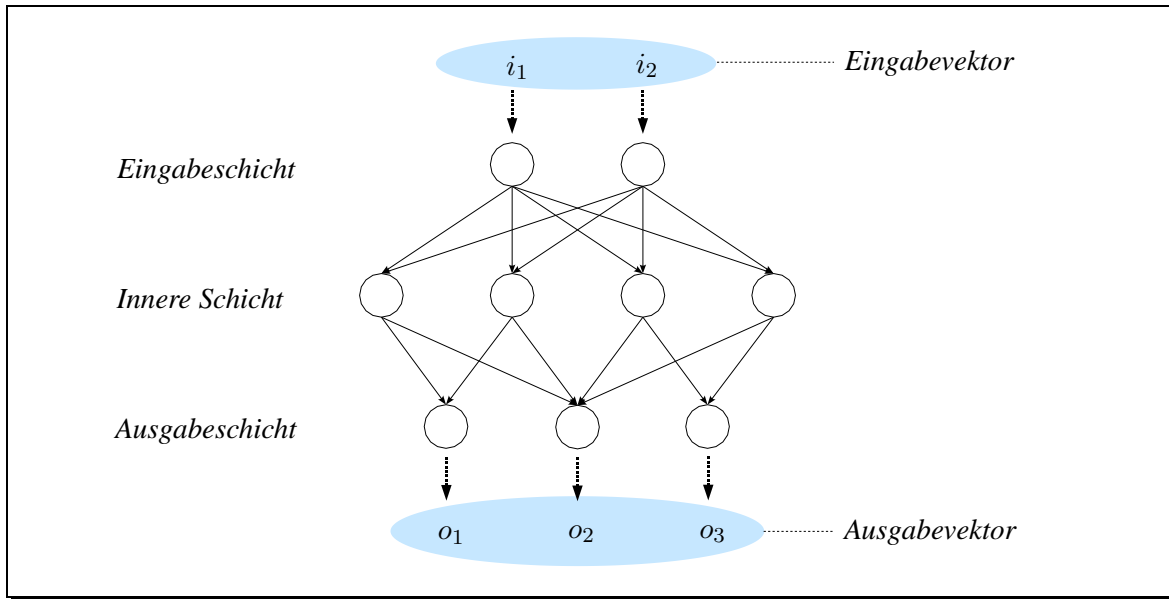


Abbildung 2.4: Aufbau eines Feedforward-Netztes mit einer inneren Schicht und seine Kommunikation mit der Umgebung

Bei den Eingaben für ein Neuron kann zwischen der *Netzeingabe* und der *externen Eingabe* unterschieden werden. Die Netzeingabe ist ein skalarer Wert, der mit Hilfe einer *Netzeingabefunktion* in Abhängigkeit von Signalen berechnet wird, die über eingehende Kanten von anderen Neuronen empfangen werden.

Meist wird zur Berechnung der Netzeingabe die gewichtete Summe der eingehenden Signale gebildet. Wenn also U_v die Menge aller Neuronen ist, mit denen ein Neuron v durch eingehende Kanten verbunden ist, a_u die Ausgabe eines Neurons $u \in U_v$ und $W(u, v)$ das Gewicht einer Kante von u nach v ist, dann wird die Netzeingabe net_v von v berechnet durch:

$$net_v = \sum_{u \in U_v} a_u W(u, v). \quad (2.4.1)$$

Die externe Eingabe eines Neurons ist dagegen eine Eingabe von außerhalb des neuronalen Netzes, z. B. zum Zwecke der Initialisierung. Üblicherweise erhalten nur Eingabeneuronen externe Eingaben.

Nach Ermittlung aller Eingaben kann die Aktivierung eines Neurons mit Hilfe der Aktivierungsfunktion berechnet werden, die im allgemeinen Fall eine Funktion von Netzeingabe, externer Eingabe und aktueller Aktivierung ist. In den meisten Modellen neuronaler Netze wird zur Berechnung der Aktivierung jedoch eine vereinfachte Aktivierungsfunktion eingesetzt, die nur die Netzwerkeingabe des Neurons berücksichtigt.

Nach der Ermittlung der Aktivierung kann die Ausgabe eines Neurons in Abhängigkeit von seiner Aktivierung mit Hilfe der *Ausgabefunktion* berechnet werden. Diese Ausgabe dient ausschließlich der Kommunikation mit der Umgebung des Netzes. In vielen Fällen stimmt die Ausgabe eines Neurons

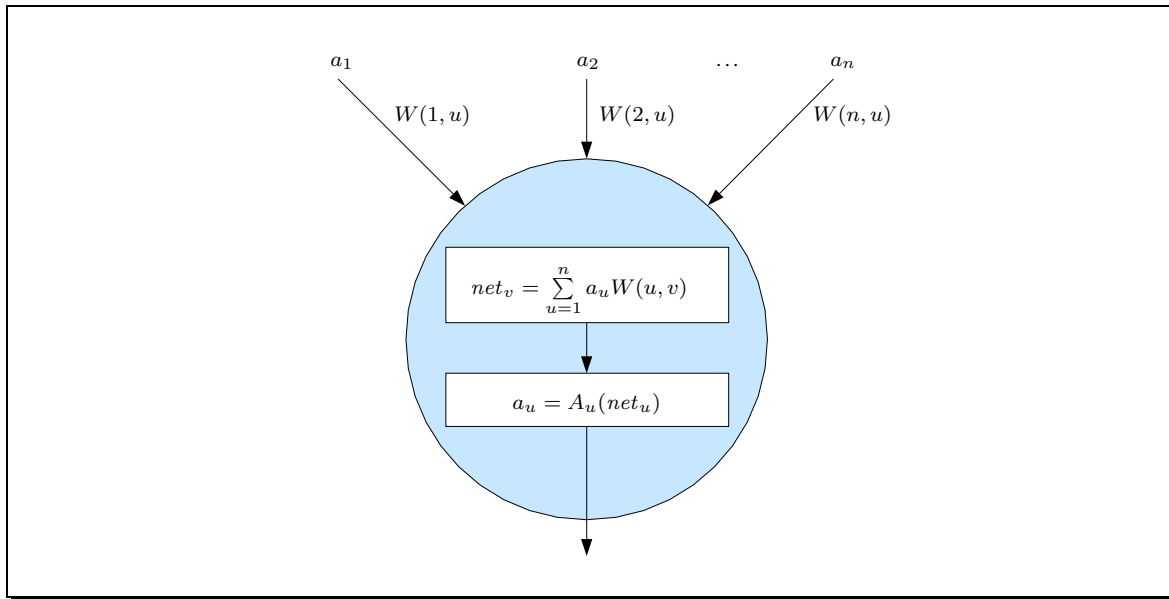


Abbildung 2.5: Berechnung von Netzeingabe net_u und Aktivierung a_u eines Neurons u ohne Berücksichtigung von aktuellem Zustand und externer Eingabe (verändert nach Gallant (1993))

mit seiner Aktivierung überein.

Ein- und Ausgaben der Neuronen können, je nach Modell, sowohl diskrete als auch kontinuierliche Werte annehmen. Im ersten Fall werden dabei meist Werte aus $\{0, 1\}$ oder $\{-1, 0, 1\}$ gewählt, im zweiten Fall Werte aus $[0, 1]$ bzw. $[-1, 1]$.

Der Ablauf der Signalverarbeitung im Neuron ist in Abbildung 2.5 skizziert. Zusammenfassend lässt sich ein generisches neuronales Netz wie folgt definieren (nach Nauck u. a. (1996)).

Definition 2.4.1 (Neuronales Netz)

Ein *neuronales Netz* ist ein Tupel (U, W, A, O, NET, ex) mit:

1. U ist eine endliche Menge von *Neuronen*,
2. W , die *Netzwerkstruktur*, ist eine Abbildung $W : U \times U \rightarrow \mathbb{R}$,
3. A ist eine Abbildung, die jedem $u \in U$ eine *Aktivierungsfunktion* $A_u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zuordnet,
4. O ist eine Abbildung, die jedem $u \in U$ eine *Ausgabefunktion* $O_u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zuordnet,
5. NET ist eine Abbildung, die jedem $u \in U$ eine *Netzeingabefunktion* $NET_u : (\mathbb{R} \times \mathbb{R})^U \rightarrow \mathbb{R}$ zuordnet und
6. ex ist die *externe Eingabefunktion* $ex : U \rightarrow \mathbb{R}$, die jedem $u \in U$ eine externe Eingabe $ex_u = ex(u)$ zuweist.

2.4.2 Dynamische Eigenschaften

Die Eingabe für ein neuronales Netz (U, W, A, O, NET, ex) mit den Eingabeneuronen $\{u_1, \dots, u_k\} \subseteq U$ besteht aus einem *Eingabevektor* $(x_1, \dots, x_k) \in \mathbb{R}^k$, wobei jedem Eingabeneuron das korrespondierende Element des Vektors als externe Eingabe zugewiesen wird:

$$\forall i \in \{1, \dots, k\} : ex(u_i) = x_i.$$

Anschließend können die Aktivierungen aller Neuronen des Netzes berechnet werden. Um sicherzustellen, dass zum Zeitpunkt der Berechnung der Aktivierung eines jeden Neurons die Signale an eingehenden Kanten bereits aktualisiert wurden, werden die Neuronen in Feedforward-Netzen in einer festgelegten Reihenfolge besucht. Nachdem entsprechend dieser Reihenfolge alle Aktivierungen aktualisiert wurden, repräsentieren die Ausgaben der Ausgabeneuronen $\{v_1, \dots, v_l\} \subseteq U$ den *Ausgabevektor* (y_1, \dots, y_l) des Netzes (Abbildung 2.4):

$$\forall i \in \{1, \dots, l\} : y_i = O_{v_i}(a_{v_i}).$$

Die Signalweiterleitung in neuronalen Netzen von der Eingabeschicht bis zur Ausgabeschicht wird als *Propagierung* bezeichnet.

2.4.3 Lernen

Für viele neuronale Netze existieren so genannte *Lernverfahren*, mit Hilfe derer die Gewichte im Netz gezielt angepasst werden können. Das Ziel dieser Anpassung ist es, die Gewichte so zu verändern, dass das Netz auf bestimmte Eingaben mit bestimmten Ausgaben reagiert und auf diese Weise auch auf neue, unbekannte Eingaben mit einer geeigneten Reaktion antwortet. Die Eingabe für Lernverfahren besteht üblicherweise aus einer *Lernaufgabe*, welche aus einer endlichen Menge von *Trainingsmustern* besteht. Jedes dieser Trainingsmuster besteht aus einem Eingabevektor (i_1, \dots, i_k) und, im Falle überwachter Lernaufgaben, einem zugehörigen Ausgabevektor (o_1, \dots, o_l) . Dieser Ausgabevektor gibt die korrekte Antwort des neuronalen Netzes bei Eingabe des assoziierten Eingabevektors an. Bei unüberwachten Lernaufgaben ist die korrekte Ausgabe des Netzes undefiniert.

Überwachte Lernaufgaben lassen sich weiter unterteilen in *einfache* und *schwere* Lernaufgaben. Bei einfachen Lernaufgaben bestehen die Trainingsmuster aus Eingabevektoren und dazugehörigen korrekten Aktivierungen für alle Neuronen. Im Fall von schweren Lernaufgaben sind innere Neuronen vorhanden, jedoch nur die korrekten Aktivierungen der Ausgabeneuronen bekannt. Schwere Lernaufgaben können weiter klassifiziert werden in Aufgaben mit *variabler Netzwerkstruktur* sowie Aufgaben mit *fixer Netzwerkstruktur*. Im ersten Fall dürfen während des Lernverfahrens innere Neuronen hinzugefügt oder entfernt sowie Änderungen an der Netzwerkstruktur vorgenommen werden. Bei Aufgaben mit fixer Netzwerkstruktur dürfen lediglich Kantengewichte modifiziert werden (Abbildung 2.6).

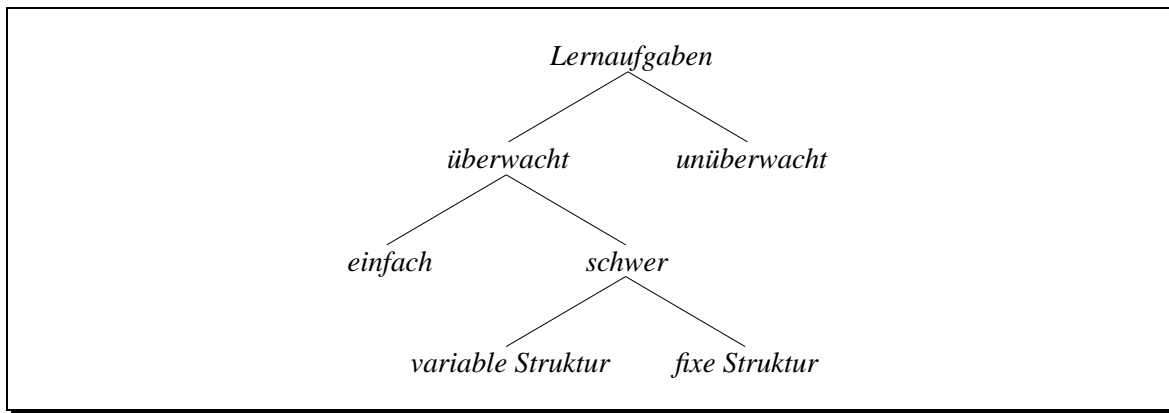


Abbildung 2.6: Klassifikation von Lernaufgaben (Gallant 1993)

2.5 Backpropagation-Netze

Nach den vorangegangenen Erläuterungen über die allgemeinen statischen und dynamischen Eigenschaften neuronaler Netze soll im Folgenden ein spezieller Netzwerktyp – das *Backpropagation-Netz* – näher betrachtet werden, da dieser die Grundlage für die weiteren Arbeiten bildet. Obwohl unter der Bezeichnung *Backpropagation* vor allem ein spezielles Lernverfahren bekannt ist (Rumelhart u. a. 1986), wird diese Bezeichnung häufig auch für so genannte Mehrschichtperzeptronen (Nauck u. a. 1996) verwendet, die jenem Verfahren in den meisten Fällen zugrunde liegen.

2.5.1 Statische Eigenschaften

Backpropagation-Netze (BPN) sind Feedforward-Netze, deren Neuronen in drei oder mehr Schichten (Eingabeschicht, innere Schichte(n), Ausgabeschicht) angeordnet sind. Es existieren nur Kanten zwischen Neuronen aufeinanderfolgender Schichten. Die Aktivierungen der Neuronen sind meist auf das Intervall $[0, 1]$ bzw. $[-1, +1]$ beschränkt. Vorwiegend wird eine sigmoide Aktivierungsfunktion (nicht-linear, monoton steigend, differenzierbar) gewählt, um die Fähigkeiten des später beschriebenen Lernverfahrens voll ausschöpfen zu können, z. B.

$$f(net) = \begin{cases} \frac{1}{1+e^{-net}} & \text{für Aktivierungen in } [0, 1] \text{ (Abbildung 2.7)} \\ -1 + \frac{2}{1+e^{-net}} & \text{für Aktivierungen in } [-1, +1] \end{cases}.$$

In einigen Details – vor allem die Netzwerkstruktur und die Art der verwendeten Aktivierungsfunktionen betreffend – weichen die Definitionen für Backpropagation-Netze verschiedener Autoren voneinander ab. So verlangen einige Definitionen (Nauck u. a. 1996), dass die eingesetzten Aktivierungsfunktionen für alle Neuronen identisch sind, andere treffen über diesen Punkt keinerlei Aussage. Auch in Bezug auf die Netzwerkstruktur gibt es unterschiedliche Anforderungen. Einige Definitionen (Gallant 1993) fordern, dass nur Neuronen benachbarter Schichten durch Kanten miteinander verbun-

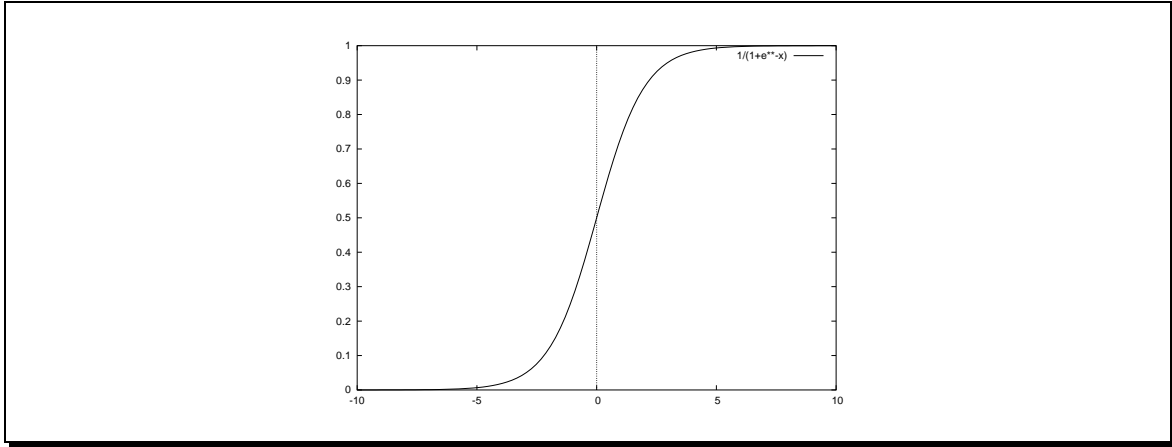


Abbildung 2.7: Sigmoide Aktivierungsfunktion

den sind, andere erlauben auch Kanten zwischen Neuronen nicht benachbarter Schichten (so genannte Shortcuts). Die folgende Definition versucht, die gängigsten Anforderungen an Backpropagation-Netze zusammenzufassen.

Definition 2.5.1 (Backpropagation-Netz)

Ein *Backpropagation-Netz* ist ein Tupel (U, W, A, O, NET, ex) mit:

1. U ist eine Menge von *Neuronen* mit
 - $U = U_1 \cup \dots \cup U_n$ für $n \geq 3$,
 - $U_i \neq \emptyset, U_i \cap U_j = \emptyset$ für $i \in \{1, \dots, n\}$ und $i \neq j$,
 - U_1 heißt *Eingabeschicht*,
 - U_n heißt *Ausgabeschicht*,
 - U_i ($1 < i < n$) heißt *innere Schicht*.
2. $W : U \times U \rightarrow \mathbb{R}$ ist die *Netzwerkstruktur*, wobei nur Kanten zwischen Neuronen benachbarter Schichten ein von 0 verschiedenes Gewicht haben:

$$W(u, v) \neq 0 \Rightarrow \exists i \in \{1, \dots, n-1\} : (u \in U_i \wedge v \in U_{i+1}).$$

Der Wert $W(u, v)$ wird als *Gewicht* der Kante zwischen den Neuronen u und v bezeichnet.

3. A ordnet jedem Neuron $u \in U$ eine (meist sigmoide) *Aktivierungsfunktion* $A_u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zu. Die *Aktivierung* a_u eines Neurons u berechnet sich dann wie folgt:

$$a_u = \begin{cases} A_u(ex(u)) = ex(u) & \text{für } u \in U_1 \\ A_u(net_u) = f_u(net_u) & \text{für } u \in U_2 \cup \dots \cup U_n, \end{cases}$$

wobei f_u eine differenzierbare Funktion ist.

4. O ordnet jedem Neuron $u \in U$ eine *Ausgabefunktion* $O_u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zur Berechnung der Ausgabe o_u zu, so dass gilt:

$$o_u = O_u(a_u) = a_u.$$

5. NET ordnet jedem Neuron $u \in U_i$ ($2 \leq i \leq n$) eine Funktion

$$NET_u : (\mathbb{R} \times \mathbb{R})^{U_{i-1}} \rightarrow \mathbb{R}$$

zu, die die *Netzeingabe* net_u wie folgt berechnet:

$$net_u = \sum_{v \in U_{i-1}} a_v W(v, u).$$

6. $ex : U_1 \rightarrow \mathbb{R}$ ordnet jeder Eingabeeinheit $u \in U_1$ eine *externe Eingabe* zu.

2.5.2 Dynamische Eigenschaften

Die Ein- und Ausgabe von Daten erfolgt bei Backpropagation-Netzen entsprechend den Ausführungen in Abschnitt 2.4.2. Da hier nur Kanten zwischen Neuronen benachbarter Schichten existieren, reicht es aus, die Aktivierungen schichtweise zu aktualisieren. Zunächst werden dazu die Aktivierungen der Eingabeneuronen mit externen Eingaben initialisiert. Anschließend werden die Aktivierungen der Neuronen der zweiten Schicht berechnet und so fort, bis die Berechnung für alle Neuronen abgeschlossen ist. Auf diese Weise wird sichergestellt, dass vor der Berechnung der Aktivierung eines Neurons sämtliche Eingangssignale bereits aktualisiert wurden. Die Neuronen innerhalb einer Schicht können dabei in beliebiger Reihenfolge, insbesondere parallel, abgearbeitet werden.

2.5.3 Das Backpropagation-Lernverfahren

Das *Backpropagation-Verfahren* (BP-Verfahren, (Rumelhart u. a. 1986)) ist ein Lernverfahren, mit dem überwachte, schwere Lernaufgaben gelöst werden können, die Netzwerkstruktur wird durch das Verfahren nicht verändert (vgl. Abbildung 2.6). Eingabe für dieses Lernverfahren ist eine überwachte Lernaufgabe, die aus diesem Grund zunächst etwas genauer definiert wird.

Definition 2.5.2 (überwachte Lernaufgabe)

Gegeben sei ein Backpropagation-Netz $\mathcal{N} = (U, W, A, O, NET, ex)$ mit den Eingabeneuronen $U_1 = \{u_1, \dots, u_k\}$ und den Ausgabeneuronen $U_n = \{v_1, \dots, v_l\}$. Es seien weiterhin $i = (i_1, \dots, i_k) \in \mathbb{R}^k$ ein Eingabevektor und $t = (t_1, \dots, t_l) \in \mathbb{R}^l$ ein Ausgabevektor, der die Sollausgabe des Netzes bei Eingabe von i darstellt.

Das Paar (i, t) wird dann als *Lernmuster* für \mathcal{N} bezeichnet, i wird dabei als *Eingabemuster*, t als

Ausgabemuster benannt. Eine Menge

$$\hat{\mathcal{L}} = \{(i_1, t_1), \dots, (i_n, t_n)\} \quad (2.5.1)$$

von Lernmustern heißt *überwachte Lernaufgabe* für \mathcal{N} . Von einer *festen überwachten Lernaufgabe* wird gesprochen, wenn die Zuordnungen von Ein- und Ausgabevektor für alle Lernmuster eindeutig sind:

$$\forall (i_1, t_1), (i_2, t_2) \in \hat{\mathcal{L}} : (i_1 = i_2 \Rightarrow t_1 = t_2).$$

2.5.3.1 Gradientenabstieg

Gradientenabstieg ist eine Technik, die ein wesentlicher Bestandteil vieler Lernverfahren für neuronale Netze ist (Gallant 1993). Im Folgenden wird daher kurz darauf eingegangen. Zunächst wird dazu der Begriff des Gewichtsvektors eingeführt.

Definition 2.5.3 (Gewichtsvektor)

Sei $W : U \times U \rightarrow \mathbb{R}$ eine endliche Netzwerkstruktur mit k Elementen ($\text{card } W = k$). Sei weiterhin $\varphi : U \times U \rightarrow \{1, \dots, k\}$ eine effektive Nummerierung (d. h. sowohl φ als auch φ^{-1} sind berechenbar) des Definitionsbereiches von W . Der Vektor $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_k)$ heißt *Gewichtsvektor* von W genau dann, wenn gilt:

$$\mathbf{w} = (W(l(\varphi^{-1}(1)), r(\varphi^{-1}(1))), \dots, W(l(\varphi^{-1}(k)), r(\varphi^{-1}(k)))). \quad (2.5.2)$$

Dabei sind l und r die Auswahlfunktionen der linken bzw. rechten Komponente eines Paares:

$$\begin{aligned} l((x, y)) &=_{df} x \\ r((x, y)) &=_{df} y. \end{aligned}$$

Angenommen, es ist ein Backpropagation-Netz \mathcal{N} gegeben, dessen Kantengewichte durch einen Gewichtsvektor $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_n)$ repräsentiert sind. Sei weiterhin eine feste Lernaufgabe $\hat{\mathcal{L}}$ gegeben. Dann lässt sich eine Fehlerfunktion $E^{(p)}(\mathbf{w})$ angeben, die für jedes Lernmuster $p = (i^{(p)}, t^{(p)}) \in \hat{\mathcal{L}}$ ein Maß für den Fehler ermittelt, der bei der Berechnung der Ausgabe bei Eingabe von $i^{(p)}$ durch das Netz auftritt.

Der Gesamtfehler $E(\mathbf{w})$ des Netzes lässt sich als Summe der Einzelfehler aller Lernmuster darstellen:

$$E(\mathbf{w}) = \sum_{p \in \hat{\mathcal{L}}} E^{(p)}(\mathbf{w}). \quad (2.5.3)$$

Davon ausgehend, dass $E(\mathbf{w})$ differenzierbar ist, lässt sich der Vektor $\nabla E(\mathbf{w})$ der partiellen Ableitungen von E nach \mathbf{w} ermitteln:

$$\nabla E(\mathbf{w}) = \left(\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial w_k} \right). \quad (2.5.4)$$

$\nabla E(\mathbf{w})$ wird auch als *Gradientenvektor* bezeichnet, da dieser Vektor die Richtung des steilsten Anstiegs der Funktion $E(\mathbf{w})$ im Punkt $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ beschreibt. Der Gradientenvektor gibt diejenige Richtung im \mathbb{R}^n an, für die eine Verschiebung des Gewichtsvektors \mathbf{w} um einen unendlich kleinen Wert zu einem maximalen Anstieg von $E(\mathbf{w})$ führen würde. Für einen kleinen positiven Wert σ kann nun ein neuer Gewichtsvektor \mathbf{w}^* berechnet werden, der sich durch die Verschiebung von \mathbf{w} in die Richtung des maximalen Anstiegs von $E(\mathbf{w})$ ergibt:

$$\mathbf{w}^* = \mathbf{w} + \sigma \nabla E(\mathbf{w}).$$

Soll der Fehler $E(\mathbf{w})$ stattdessen zum Zwecke einer lokalen Minimierung verkleinert werden, muss der Gewichtsvektor in die entgegengesetzte Richtung verschoben werden:

$$\mathbf{w}^* = \mathbf{w} - \sigma \nabla E(\mathbf{w}). \quad (2.5.5)$$

Diese Modifikation des Gewichtsvektors kann eingesetzt werden, um das Verfahren des *Gradientenabstiegs* für eine vorgegebene Haltebedingung zu skizzieren:

`gradientenabstieg()`

- 1: Initialisiere $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_k)$ mit zufällig gewählten Gewichten $w_i \in \mathbb{R}$.
- 2: **while** „Haltebedingung nicht erfüllt“ **do**
- 3: Berechne einen neuen Gewichtsvektor \mathbf{w} gemäß 2.5.5.
- 4: **end while**

Bei der praktischen Umsetzung dieses Verfahrens kann eine Reihe von Problemen auftreten (Gallant 1993):

- **Differenzierbarkeit der Fehlerfunktion**

Die wichtigste Voraussetzung zur Durchführung des Gradientenabstiegs ist die Differenzierbarkeit der Fehlerfunktion E . Diese Voraussetzung kann ein Problem darstellen, weil das natürliche Fehlermaß – der prozentuale Anteil falscher klassifizierter Ausgaben – entweder einen Anstieg von 0 oder aber einen undefinierten Anstieg aufweist. Aus diesem Grund muss ein Fehlermaß verwendet werden, welches dem natürlichen Fehler einerseits ähnlich ist, andererseits aber differenzierbar ist. Für das BP-Verfahren wird daher als Fehlermaß die Summe der quadrierten Abweichungen zwischen der tatsächlichen und der durch die Lernaufgabe $\hat{\mathcal{L}}$ vorgegebenen Ausgabe gewählt:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{p \in \hat{\mathcal{L}}} \sum_{v \in U_n} (t_v^{(p)} - a_v^{(p)})^2. \quad (2.5.6)$$

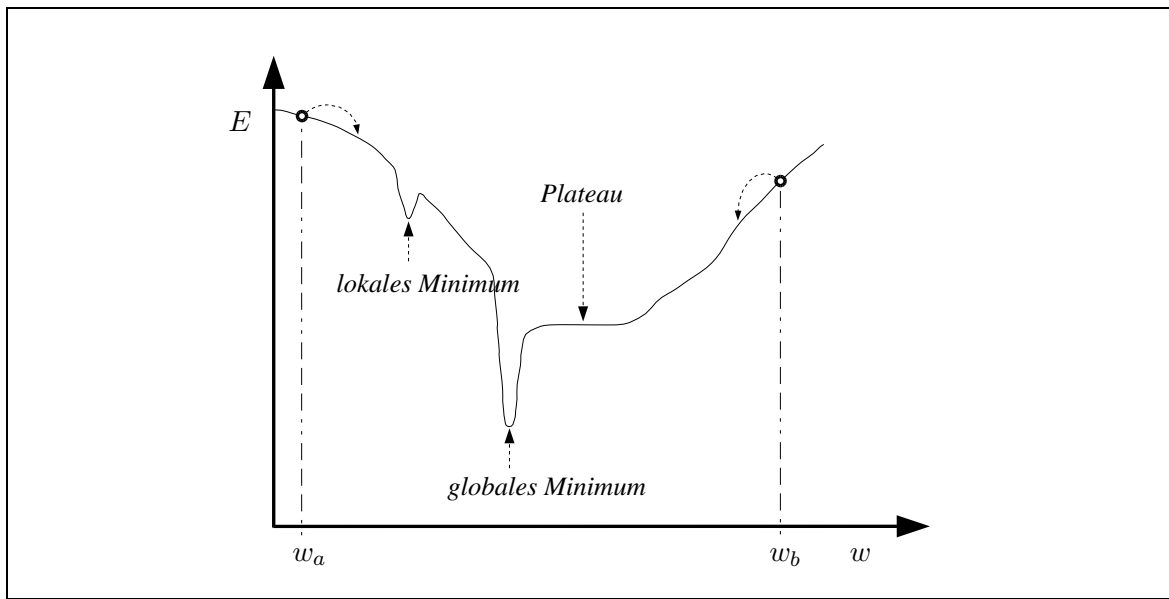


Abbildung 2.8: Fehlerfunktion mit lokalem und globalem Minimum (Gallant 1993)

- **Haltebedingung**

Die Formulierung der im Schritt 2.5.3.1 erwähnten Haltebedingung stellt häufig ein Problem dar. Im Idealfall wird das Verfahren gestoppt, wenn der Anstieg der Fehlerfunktion null ist. Gerade aber bei Fehlerfunktionen, die sich asymptotisch an einen Grenzwert annähern oder Plateaus bilden, müssen andere Kriterien für die Beendigung des Verfahrens herangezogen werden.

- **Wahl von σ**

Die Wahl eines geeigneten Wertes für σ ist entscheidend für den Erfolg des Verfahrens, stellt jedoch häufig ein Problem dar. Wird σ zu groß gewählt, besteht die Gefahr, das Minimum durch zu große Schritte im Gewichtsraum zu „überspringen“ oder zwischen festen Punkten im Suchraum zu oszillieren. Ein zu kleiner Wert für σ führt zu einem hohen zeitlichen Aufwand beim Gradientenabstieg.

- **Lokale Minima**

Lernverfahren auf Basis des Gradientenabstiegs finden nicht notwendigerweise ein globales Minimum der Fehlerfunktion. Entscheidend für die Qualität der ermittelten Lösung ist daher oft die Wahl des initialen Gewichtsvektors.

Abbildung 2.8 zeigt eine Fehlerfunktion E in Abhängigkeit eines einzelnen Gewichtes w und exemplarisch einige der aufgeführten Problemfälle. Ausgehend vom Startwert w_a besteht hier die Gefahr, durch Gradientenabstieg nur ein lokales Minimum von E zu ermitteln. Wird hingegen w_b als initialer Wert für w ausgewählt, könnte das Verfahren bei ungeeigneter Wahl der Abbruchbedingung mit Erreichen des dargestellten Plateaus vorzeitig beendet werden.

2.5.3.2 Fehlerweiterleitung

Ein Gradientenabstiegsverfahren, welches das erste der genannten Probleme nicht aufweist, ist das Backpropagation-Verfahren (Rumelhart u. a. 1986). Die von diesem Verfahren berücksichtigte Fehlerfunktion ist einerseits differenzierbar. Andererseits liefert sie für viele praktische Problemstellungen, insbesondere Klassifikationsaufgaben, ein plausibles Fehlermaß, da sie die Abweichung einer erwarteten von einer tatsächlichen Netzwerkausgabe einbezieht.

Backpropagation bezeichnet die rückwärtige Ausbreitung eines Fehlersignals durch das Netzwerk. Die Grundidee dieses Verfahren lässt sich wie folgt skizzieren (Nauck u. a. 1996):

Nach der Propagierung eines Eingabemusters wird das zugehörige Ausgabemuster mit der Ausgabe des Netzes verglichen und ein Fehler ermittelt. Dieser Fehler wird dann rückwärts, also in Richtung der Eingabeschicht, durch das Netz propagiert. Aufgrund des Fehlersignals sind die inneren Einheiten in der Lage, ihren eigenen Fehler zu bestimmen. Die Fehler aller Einheiten bilden schließlich die Grundlage für die Gewichtsmodifikation, welche dann entsprechend Gleichung 2.5.5 erfolgt.

Zusammengefasst lässt sich das Backpropagation-Verfahren in folgender Weise definieren.

Definition 2.5.4 (Backpropagation-Verfahren)

Gegeben sei ein Backpropagation-Netz (U, W, A, O, NET, ex) und eine feste Lernaufgabe $\hat{\mathcal{L}}$. Das überwachte Lernverfahren, welches nach Propagierung eines Eingabemusters $i^{(p)}$, $p \in \hat{\mathcal{L}}$ das Gewicht $W(u, v)$ einer Kante zwischen zwei Neuronen $u \in U_{i-1}$ und $v \in U_i$, $2 \leq i \leq n$ für ein $\sigma > 0$ gemäß

$$\Delta_p W(u, v) = \sigma \delta_v^{(p)} a_u^{(p)} \quad (2.5.7)$$

verändert, wobei

$$\delta_v^{(p)} = \begin{cases} f'_v(net_v^{(p)})(t_v^{(p)} - a_v^{(p)}) & \text{falls } v \in U_n \\ f'_v(net_v^{(p)}) \sum_{w \in U_{j+1}} \delta_w^{(p)} W(v, w) & \text{falls } v \in U_j, 2 \leq j < n \end{cases} \quad (2.5.8)$$

gilt, heißt *Backpropagation-Verfahren* (BP-Verfahren, nach Nauck u. a. (1996)). Dabei ist $a_u^{(p)}$ die Aktivierung eines Neurons u nach der Propagierung eines Eingabemusters $i^{(p)}$ und $t_v^{(p)}$ die durch das Ausgabemuster $t^{(p)}$ für ein Ausgabeneuron $v \in U_n$ vorgegebene Ausgabe (Aktivierung).

Die Konstante σ wird auch als *Lernrate* bezeichnet, δ_v als *partieller Fehler* von v .

2.5.3.3 Durchführung von Backpropagation

Die praktische Durchführung der Gewichts Anpassung im BP-Verfahrens erfolgt in drei Schritten (verändert nach Nauck u. a. (1996)):

- (i) In der ersten Phase wird dem Netzwerk eine Eingabe präsentiert und vorwärts durch das Netz propagiert.

- (ii) In der zweiten Phase werden die partiellen Fehler aller Neuronen ermittelt. Die Fehler der Ausgabeneuronen werden dabei durch Vergleich mit dem Ausgabemuster bestimmt (2.5.8 für $v \in U_n$). Diese Fehler werden anschließend über die zur Ausgabeschicht führenden Kanten – gewichtet mit deren Kantengewichten – zur vorangegangenen inneren Schicht zurückgeleitet. Die Neuronen dieser Schicht können nun anhand der Fehlersignale aus der nachfolgenden Schicht ihre eigenen partiellen Fehler ermitteln (2.5.8 für $v \in U_j$, $2 \leq j < n$). Der Vorgang der Weiterleitung der Fehler an die vorangegangene Schicht (Backpropagation) und die Bestimmung der partiellen Fehler der Neuronen dieser Schicht wiederholt sich nun, bis alle inneren Schichten bearbeitet wurden. Anschließend werden für alle Neuronen die Gewichtsänderungen der eingehenden Kanten in Abhängigkeit von ihrem partiellen Fehler und ihrer aktuellen Aktivierung berechnet (2.5.7).
- (iii) In der dritten Phase werden schließlich die Gewichte aller Kanten entsprechend der ermittelten Änderungen angepasst.

Diese Schritte werden für alle Lernmuster wiederholt durchgeführt, bis eine vorgegebene Abbruchbedingung erfüllt ist. Dabei werden dem Verfahren die Muster entweder in fester oder zufälliger Reihenfolge präsentiert. Hierbei ist anzumerken, dass diese Form der Gewichts Anpassung nicht exakt den in Abschnitt 2.5.3.1 beschriebenen Gradientenabstieg realisiert. Dies kann jedoch leicht durch eine häufig angewandte Modifikation des Verfahrens erfolgen. Dazu werden die Gewichte nicht jeweils nach der Propagierung eines einzelnen Lernmusters, sondern erst nach der Verarbeitung aller Muster angepasst. Die Änderung eines Gewichtes $W(u, v)$ ergibt sich dabei durch Aufsummieren der einzelnen Gewichtsänderungen über alle Lernmuster:

$$\Delta W(u, v) = \sum_{p \in \hat{\mathcal{L}}} \Delta_p W(u, v). \quad (2.5.9)$$

Die Schritte (i) und (ii) werden also zunächst für alle Lernmuster ausgeführt und die ermittelten Gewichtsänderungen aufsummiert, erst danach erfolgt die Aktualisierung der Gewichte in Schritt (iii). Der Vorteil dieser Vorgehensweise liegt darin, dass Änderungen, die durch die Verarbeitung eines Lernmusters hervorgerufen wurden, nicht durch nachfolgende Lernmuster rückgängig gemacht werden.

Auch die Berechnung der Gewichtsänderung erfolgt häufig in einer abgewandelten Form (Rumelhart u. a. 1986, Nauck u. a. 1996, Zell 1997): Wurde die vergangene Änderung $\Delta_p^t W(u, v)$ eines Gewichtes $W(u, v)$ zum Zeitpunkt t berechnet, dann ergibt sich die aktuelle Gewichtsänderung $\Delta_p^{t+1} W(u, v)$ entsprechend

$$\Delta_p^{t+1} W(u, v) := \sigma \delta_v^{(p)} a_u^{(p)} + \beta \Delta_p^t W(u, v) \quad (2.5.10)$$

bzw. für den Fall der für alle Muster einheitlichen Anpassung (2.5.9)

$$\Delta^{t+1} W(u, v) := \sum_{p \in \hat{\mathcal{L}}} \sigma \delta_v^{(p)} a_u^{(p)} + \beta \Delta^t W(u, v). \quad (2.5.11)$$

Die Konstante β wird dabei als *Moment* bezeichnet. Der erste Summand entspricht der ursprünglichen Anpassung des Gewichtes $W(u, v)$. Der zweite Summand repräsentiert einen Anteil der vorangegangenen Gewichtsänderung. Das Ziel dieser Maßnahme besteht in einer Unterdrückung hochfrequenter Gewichtsänderungen während des Gradientenabstiegs. Der resultierende Gradientenabstieg zeigt eine gewisse Trägheit und neigt dazu, die allgemeine Richtung der Gewichtsänderungen beizubehalten. Außerdem führen wiederholte Änderungen des Gewichtsvektors in die gleiche Richtung zu einer effektiven Vergrößerung der Schrittweite beim Gradientenabstieg, die in der Folge zu einer schnelleren Konvergenz des Verfahrens führt. Ein weiterer Vorteil dieser Anpassung besteht deshalb darin, dass für die Lernrate ein sehr kleiner Wert gewählt werden kann und das Verfahren infolgedessen bei häufigen Richtungsänderungen des Gradienten diese besser verfolgen kann. Problematische Bereiche der Fehlerfunktion wie etwa Plateaus oder enge Schluchten können während des Gradientenabstiegs so leichter überwunden werden, das (lokale) Minimum der Fehlerfunktion wird schneller gefunden.

Ein anderer Ansatz zur Verbesserung der Konvergenzgeschwindigkeit besteht in einer dynamischen Anpassung der Lernrate während des BP-Verfahrens. Nähert sich der aktuelle Gewichtsvektor während des Verfahrens dem Minimum der Fehlerfunktion, nimmt die Änderung des Fehlers zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten ΔE des BP-Verfahrens häufig ab. Dies kann durch die Anpassung der Lernrate in Abhängigkeit von ΔE kompensiert werden. Dabei ist jedoch zu beachten, dass plötzliche Richtungsänderungen des Gradientenvektors bei großen Lernraten unter Umständen nicht mehr berücksichtigt werden.

2.6 Vom Einzugsgebiet zum Backpropagation-Netz

Im Abschnitt 2.2.1 wurde beschrieben, welche Daten für eine vereinfachte Betrachtung der Stickstoffdynamik in einem verteilten Einzugsgebiet berücksichtigt werden müssen. Neben der Menge S der betrachteten räumlichen Einheiten im Einzugsgebiet sind dies für jede Einheit

- die N-Austragsfunktion,
- die Anteile vertikaler und lateraler Abflusskomponenten und
- die zugehörige Downstream-Einheit.

Im Folgenden wird beschrieben, wie sich diese Daten mit Hilfe eines speziellen Backpropagation-Netzen, im Weiteren als HydroNet bezeichnet, repräsentieren lassen.

2.6.1 Aufbau des Netzwerkes

2.6.1.1 Neuronen

Die Neuronen des HydroNet ergeben sich in folgender Weise:

1. Die Eingabeschicht besteht aus einem einzigen Neuron u_{in} , welches – zusammen mit den von

ihm ausgehenden Kanten – die Stickstoffeinträge durch Düngung im Einzugsgebiet repräsentiert.

2. Jede räumliche Einheit $s \in S$ wird durch ein inneres Neuron u_s dargestellt.
3. Die Ausgabeschicht besteht ebenfalls aus nur einem Neuron u_{out} , welches den Vorfluter des betrachteten Einzugsgebiet repräsentiert.

Dem Eingabeneuron wird die externe Eingabe 1 zugewiesen.

2.6.1.2 Netzwerkstruktur

Die Netzwerkstruktur ergibt sich aus der hydrologischen Topologie zwischen räumlichen Einheiten im Einzugsgebiet wie folgt:

1. Jeder laterale Stofffluss (Interflow bzw. Oberflächenabfluss) von einer räumlichen Einheit $s \in S$ zu ihrer Downstream-Einheit $ds(s)$ wird durch eine Kante $(u_s, u_{ds(s)})$ zwischen den zugehörigen inneren Neuronen repräsentiert. Diese Kanten werden im Folgenden als *Interflowkanten* bezeichnet. Jedes innere Neuron besitzt genau eine ausgehende Interflowkante.
2. Jeder vertikale Stofffluss von einer räumlichen Einheit in den Grundwasserkörper (Grundwasserabfluss) wird durch eine Kante zwischen dem zugehörigen inneren Neuron und dem Ausgabeneuron dargestellt. Da das Ausgabeneuron den Vorfluter repräsentiert, wird der Grundwasserkörper in diesem Modell mit dem Vorfluter gleichgesetzt. Diese Annahme setzt voraus, dass Prozesse im Grundwasserkörper, die den Stofftransport beeinflussen, nicht betrachtet werden. Die resultierenden Kanten heißen im Weiteren *Grundwasserkanten*. Jedes innere Neuron besitzt genau eine Grundwasserkante.
3. Das Eingabeneuron wird durch je eine Kante mit jedem inneren Neuron verknüpft. Diese Kanten repräsentieren Stickstoffeinträge durch Düngung auf den räumlichen Einheiten, die durch die inneren Neuronen repräsentiert werden. Diese Kanten werden im Folgenden als *Düngekanten* bezeichnet.

Darüber hinaus existieren keine weiteren Kanten. Ein strenger schichtartiger Aufbau, der, wie bei Backpropagation-Netzen üblich, ausschließlich Kanten zwischen Neuronen benachbarter Schichten zulässt, ist beim HydroNet wegen der naturräumlichen Grundlage der Topologie nicht gegeben. Aus dem gleichen Grund ist das HydroNet zyklensfrei.

2.6.1.3 Aktivierungsfunktionen

Die Aktivierungsfunktionen der inneren Neuronen des HydroNet repräsentieren die N-Austragsfunktionen der räumlichen Einheiten, die durch die Neuronen dargestellt werden. Dabei bleiben alle anderen den N-Austrag beeinflussenden Faktoren unberücksichtigt. Aus diesem Grund muss jede Aktivierungsfunktion so gewählt werden, dass sie die Beziehung zwischen N-Eintrag und N-Austrag unter der Annahme repräsentativer Rahmenbedingungen auf der betrachteten räumlichen Einheit wiedergibt. In

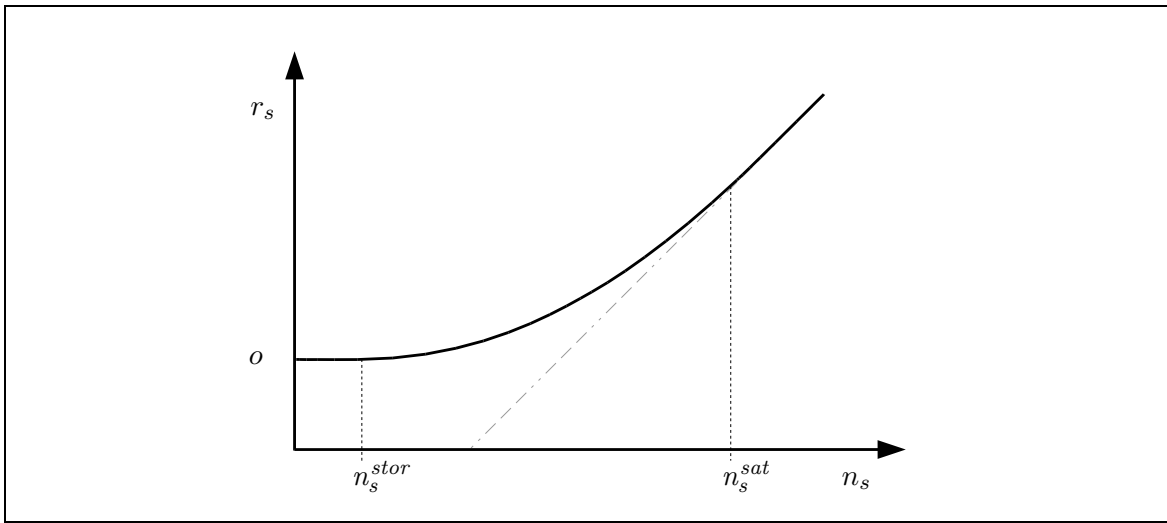


Abbildung 2.9: Idealisierte Darstellung der N-Austragsfunktion r_s einer räumlichen Einheit s

Abschnitt 2.8 wird näher auf mögliche Vorgehensweisen zur Ableitung der Aktivierungsfunktionen eingegangen.

Sowohl für das Eingabe- als auch das Ausgabeneuron wird als Aktivierungsfunktion die Identitätsfunktion gewählt, da eingehende Signale an diesen Neuronen ohne Verarbeitung weitergeleitet werden sollen.

Abbildung 2.9 zeigt die idealisierte Beziehung zwischen N-Eintrag n_s und N-Austrag r_s einer räumlichen Einheit s als Grundlage für die Ermittlung der Aktivierungsfunktionen innerer Neuronen. Der Verlauf einer solchen Funktion lässt sich in drei Intervalle unterteilen:

1. $n_s < n_s^{stor}$
Die räumliche Einheit ist in der Lage, die zugeführten N-Mengen vollständig zu speichern oder abzubauen. Der N-Austrag bleibt dabei unverändert.
2. $n_s^{stor} \leq n_s \leq n_s^{sat}$
Abhängig vom N-Eintrag (und den übrigen, fixen Rahmenbedingungen) der räumlichen Einheit wird ein Teil des Stickstoffs abgebaut, der Rest wird aus der Einheit ausgetragen.
3. $n_s > n_s^{sat}$
Die N-Abbaukapazität der räumlichen Einheit ist ausgeschöpft, zugeführter Stickstoff wird vollständig aus der Einheit ausgetragen.

Ein N-Austrag $o \geq 0$, der ohne Eintrag von Stickstoff auftritt, kann durch die Abgabe von gespeichertem Stickstoff hervorgerufen werden. Die Größe dieses Speichers und damit von o ist abhängig von den physiografischen Eigenschaften der entsprechenden räumlichen Einheit und den klimatischen Bedingungen, die während der Ermittlung der N-Austragsfunktion angenommen wurden.

Weitere Erörterungen über die zur Darstellung der N-Austragsfunktionen verwendeten Funktionstypen erfolgen in Abschnitt 2.8.2.

2.6.1.4 Kantengewichte

Die Gewichte der Kanten im HydroNet ergeben sich wie folgt:

1. Das Gewicht einer Düngekante, die zu einem inneren Neuron führt, entspricht der Stickstoffmenge, die über Düngung in die durch das innere Neuron repräsentierte Fläche eingebracht wird. Wenn also s eine räumliche Einheit ist und n_s der Stickstoffeintrag in diese Einheit, dann gilt:

$$W(u_{in}, u_s) = n_s. \quad (2.6.1)$$

2. Das Gewicht einer Interflowkante, die von einem inneren Neuron u_s ausgeht, entspricht dem lateralen Anteil $f_{lat}(s)$ des aus der zugehörigen räumlichen Einheit s ausgetragenen Stickstoffs.
3. Das Gewicht einer Grundwasserkante, die von einem inneren Neuron u_s ausgeht, entspricht dem vertikalen Anteil $f_{vert}(s)$ des aus der zugehörigen räumlichen Einheit s ausgetragenen Stickstoffs.

Die Gewichte von Düngekanten entsprechen damit absoluten Stickstoffmengen, die Gewichte von Interflow- und Grundwasserkanten prozentualen Anteilen am Stickstoffgesamtaustrag einer Fläche. Aus diesem Grund ergibt die Summe der Gewichte der ausgehenden Kanten eines Neurons stets 1. Weiterhin sind alle Kantengewichte positiv, da sie entweder Stoffmengen (Düngekanten) oder Stoffmengenanteile (Interflow- und Grundwasserkanten) repräsentieren.

Abbildung 2.10 zeigt beispielhaft die verschiedenen Kantentypen in einem HydroNet auf der Basis eines kleinen Einzugsgebiet mit 13 Flächen (vgl. Abbildung 2.3).

2.6.1.5 Das HydroNet

Zusammenfassend lässt sich das HydroNet damit wie folgt definieren.

Definition 2.6.1 (HydroNet)

Das *HydroNet* ist ein Feedforward-Netz (U, W, A, O, NET, ex) mit folgenden Eigenschaften:

1. U ist eine Menge von Neuronen mit
 - $U = U_{in} \cup U_S \cup U_{out}$,
 - $U_{in} = \{u_{in}\}$ ist die Eingabeschicht mit einem einzigen Eingabeneuron u_{in} ,
 - $U_{out} = \{u_{out}\}$ ist die Ausgabeschicht mit einem einzigen Ausgabeneuron u_{out} ,
 - $U_S = \{u_1, \dots, u_k\}$ ist die Menge der inneren Neuronen, wobei das Neuron u_i die räumliche Einheit $s_i \in S$ für $i \in \{1, \dots, k\}$ repräsentiert.
2. $W : U \times U \rightarrow \mathbb{R}^+$ ist die Netzwerkstruktur mit folgenden Eigenschaften:

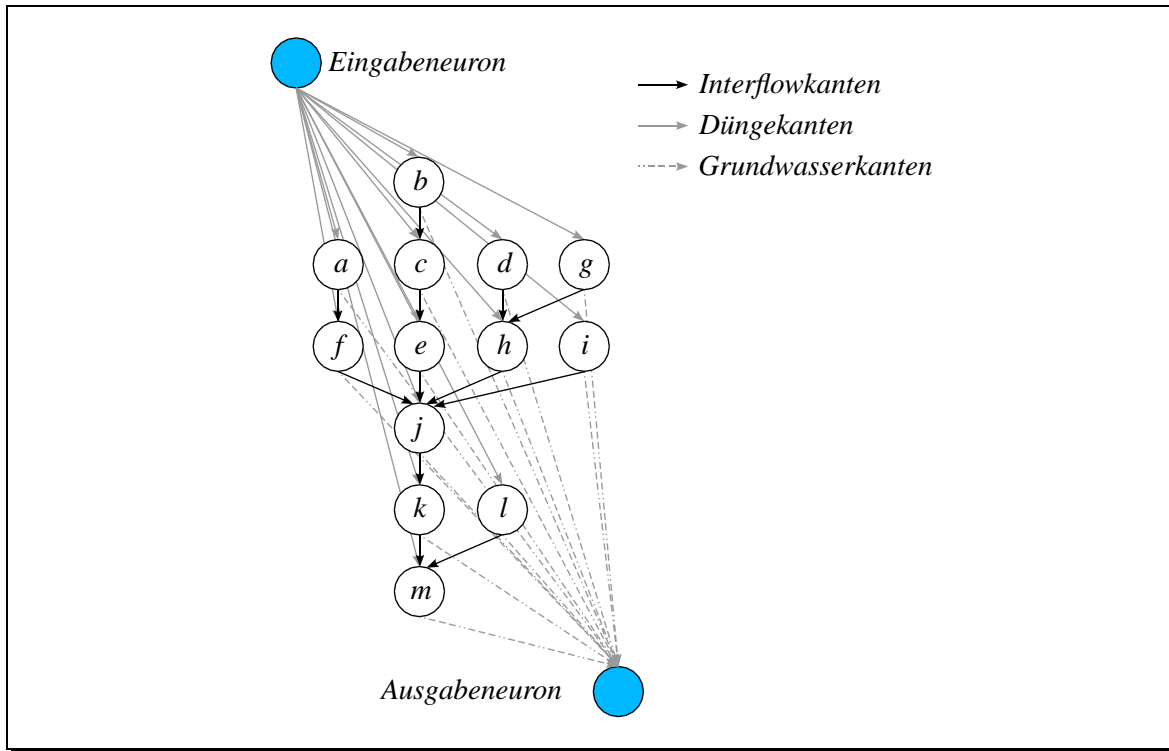


Abbildung 2.10: Interflow-, Dünge- und Grundwasserkanten in einem HydroNet

- Die Kanten (u_{in}, v) für $v \in U_S$ heißen *Düngekanten*, dabei bezeichnet

$$\mathbf{w}^N = (W(u_{in}, u_1), \dots, W(u_{in}, u_k))$$

den Vektor der Gewichte all dieser Kanten.

- Die Kanten (u, v) für $u \in U_S$ und $v \in U_S \cup U_{out}$ heißen *Abflusskanten*.
- Der Wasserkörper erhält keine Stickstoffeinträge durch Düngung:

$$W(u_{in}, u_{out}) = 0.$$

- Die Gewichte der ausgehenden Kanten innerer Neuronen sind normiert:

$$\forall u_s \in U_S : \sum_{v \in U} W(u_s, v) = W(u_s, u_{ds(s)}) + W(u_s, u_{out}) = 1.$$

3. A ordnet jedem Neuron $u \in U$ eine Funktion $A_u : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ zur Berechnung der Aktivierung

a_u zu:

$$a_u = \begin{cases} A_u(ex(u)) = ex(u) & \text{für } u = u_{in} \\ A_u(net_u) = net_u & \text{für } u = u_{out} \\ A_u(net_u) = f_u(net_u) & \text{für } u \in U_S, \end{cases}$$

wobei f_u eine differenzierbare Funktion ist.

4. O ordnet jedem Neuron $u \in U$ als Ausgabefunktion $O_u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zur Berechnung der Ausgabe o_u die Identitätsfunktion zu:

$$o_u = O_u(a_u) = a_u.$$

5. NET ordnet jedem Neuron $u \in U_S \cup U_{out}$ eine Funktion

$$NET_u : (\mathbb{R} \times \mathbb{R})^{U_S \cup U_{in}} \rightarrow \mathbb{R}$$

zu, die die Netzeingabe net_u wie folgt berechnet:

$$net_u = \sum_{v \in U_S \cup U_{in}} a_v W(v, u).$$

6. $ex : U_{in} \rightarrow \mathbb{R}$ ordnet der Eingabeeinheit u_{in} die externe Eingabe 1 zu:

$$ex(u_{in}) = 1.$$

2.6.2 Dynamische Eigenschaften

Wie in der vorangegangenen Definition beschrieben, liegen die inneren Neuronen U_S des HydroNet zunächst in ungeschichteter Form vor. Dies stellt jedoch für die praktische Umsetzung der Propagierung von Signalen ein Problem dar, weil vor der Berechnung der Netzeingabe eines Neurons sichergestellt werden muss, dass die Signale an allen eingehenden Kanten bereits aktualisiert wurden.

Dies kann durch eine geeignete Schichtung der inneren Neuronen geschehen, so dass gilt:

$$U_S = U_1 \cup \dots \cup U_n. \quad (2.6.2)$$

Die Zuordnung der Neuronen zu den Schichten U_1, \dots, U_n muss dabei so erfolgen, dass für je zwei Neuronen $u, v \in U_S$ gilt:

$$W(u, v) \neq 0 \Rightarrow \exists i, j \in \{1, \dots, n\} : u \in U_i \wedge v \in U_j \wedge i > j. \quad (2.6.3)$$

Folgende rekursive Funktion `setLayer` stellt eine solche schichtweise Anordnung her, dabei bezeichnet $layer(u)$ diejenige Schicht, der ein Neuron u zugeordnet wird:

```

setLayer(v, l)
1: layer(v) := MAX(layer(v), l)
2: for all u ∈ US do
3:   if W(u, v) ≠ 0 then
4:     setLayer(u, l + 1)
5:   end if
6: end for

init()
1: for all u ∈ U do
2:   layer(u) := 0
3: end for
4: setLayer(uout, 0)

```

Die Initialisierung der Zuordnung erfolgt durch Aufruf der Funktion `init()`, die zunächst jedes Neuron der Schicht 0 zuordnet und anschließend die Rekursion zur Bestimmung der tatsächlichen Schicht durch den Aufruf `setLayer(uout, 0)` startet. Am Ende der Rekursion bestimmt für jedes Neuron u der Wert der Funktion $layer(u)$ die Nummer der Schicht, der das Neuron zugeordnet wird. Die Schichten U_1, \dots, U_n ergeben sich somit durch:

$$U_i := \{u : layer(u) = i\} \quad (1 \leq i \leq n)$$

Ist die Bedingung (2.6.3) nach Anwendung dieser Funktionen sichergestellt, kann die Ermittlung der Aktivierungen der inneren Neuronen schichtweise erfolgen. Dazu wird zunächst dem Eingabeneuron u_{in} die externe Eingabe 1 zugeordnet.

Absteigend von der Schicht U_n bis zur Schicht U_1 können nun die Netzwerkeingaben und Aktivierungen aller Neuronen schichtweise berechnet werden, bis auch die Aktivierung des Ausgabeneurons $a_{u_{out}}$ ermittelt wurde. Dieser Wert entspricht – bei geeigneter Wahl aller Netzwerkparameter – dem Stickstoffaustrag aus dem betrachteten Einzugsgebiet in dessen Vorfluter. In diesem Fall gilt also:

$$a_{u_{out}} = z_E(\mathbf{n}). \quad (2.6.4)$$

Auf die Vorgehensweise bei der Ermittlung der Aktivierungsfunktionen sowie der Kantengewichte von Interflow- und Grundwasserkanten wird im Kapitel 3 detailliert eingegangen.

2.7 Ein neuronaler Lösungsansatz für das Stickstoffkonfigurationsproblem

Im Abschnitt 2.2 wurde das Problem der Optimierung von Stickstoffeinträgen (NCP) auf den räumlichen Einheiten eines Einzugsgebietes beschrieben. Im vorangegangenen Abschnitt wurde gezeigt, wie sich die für ein NCP relevanten Gebietseigenschaften (räumliche Einheiten, laterale und vertikale

Stofftransportkomponenten, für den Stickstoffabbau relevante Prozesse) mit Hilfe eines Neuronalen Netzes (HydroNet) darstellen lassen. Im Abschnitt 2.5.3 wurde weiterhin dargelegt, wie die Gewichte eines Backpropagation-Netzes mit Hilfe des BP-Verfahrens so angepasst werden können, dass das Netzwerk auf bestimmte Eingaben mit einer festgelegten Ausgabe reagiert.

Im Folgenden soll nun gezeigt werden, wie ein modifiziertes BP-Verfahren genutzt werden kann, um die Kantengewichte eines HydroNet so anzupassen, dass die Gewichte der Düngekanten eine Lösung für das NCP darstellen.

2.7.1 Ein Lernverfahren für das HydroNet

In Abschnitt 2.2.5 wurden zwei praktische Problemstellungen NCP_A und NCP_B aus dem NCP abgeleitet. Hier soll zunächst auf die Lösung von NCP_A eingegangen werden.

Gegeben ist dabei eine obere Schranke z_E^{max} für die Eintragsfunktion $z_E(\mathbf{n})$, die den maximal zulässigen N-Austrag in den Vorfluter des betrachteten Einzugsgebietes festlegt. Außerdem ist ein Entscheidungsvektor $\mathbf{n}^{opt} = (n_{s_1}^{opt}, \dots, n_{s_k}^{opt})$ gegeben, der für alle Flächen $s_i \in S$ ($1 \leq i \leq k$) den für die Bewirtschaftung von s_i optimalen N-Eintrag beinhaltet. Gesucht ist eine Konfiguration von Stickstoffeinträgen \mathbf{n} , die

1. die Einhaltung der oberen Schranke sicherstellt:

$$z_E(\mathbf{n}) \leq z_E^{max} \quad (2.7.1)$$

2. und die dafür aufzuwendenden Kosten $z_K(\mathbf{n})$ minimiert.

Der initiale Entscheidungsvektor \mathbf{n}^{opt} weist folgende Eigenschaften auf:

1. Der zugehörige N-Austrag ist größer als der maximal zulässige Austrag:

$$z_E(\mathbf{n}^{opt}) > z_E^{max}. \quad (2.7.2)$$

2. Es fallen keine Kosten an:

$$z_K(\mathbf{n}^{opt}) = 0. \quad (2.7.3)$$

Um das Problem NCP_A zu lösen, wird zunächst ein HydroNet entsprechend der Beschreibung in Abschnitt 2.6.1 erzeugt. Da das HydroNet eine Variante eines Backpropagation-Netzes ist, kann das in Definition 2.5.4 beschriebene BP-Verfahren zur Anpassung der Gewichte im HydroNet angewandt werden. Um jedoch der Semantik der einzelnen Kanten und Neuronen Rechnung zu tragen, müssen einige Änderungen gegenüber dem Originalverfahren vorgenommen werden:

1. Die Gewichte der Düngekanten \mathbf{w}^N des HydroNet werden nicht mit Zufallswerten, sondern mit

dem Entscheidungsvektor \mathbf{n}^{opt} initialisiert:

$$\mathbf{w}^N := \mathbf{n}^{opt}.$$

2. Während des Lernens dürfen die Gewichte von Interflow- und Grundwasserkanten nicht modifiziert werden, da diese statische Eigenschaften des zugrunde liegenden Einzugsgebietes repräsentieren. Folglich werden bei der Gewichts Anpassung nur die Gewichte von Düngekanten berücksichtigt.
3. Die Lernaufgabe besteht aus nur einem einzigen Lernmuster $\hat{\mathcal{L}} = \{(1, o)\}$. Der Wert von o entspricht dabei dem N-Gesamteintrag in den Vorfluter des Einzugsgebietes, der aus der Änderung der Stickstoffeinträge im Gebiet resultieren soll. Für die Problemstellung NCP_A wird dafür der maximal zulässige N-Austrag gewählt:

$$o = z_E^{max}.$$

Eine Begründung der Wahl dieses Wertes für o erfolgt mit Satz 1 (S. 59).

Das modifizierte BP-Verfahren (BP*-Verfahren) zur Lösung von NCP_A ist damit wie folgt definiert.

Definition 2.7.1 (BP*-Verfahren)

Das *BP*-Verfahren* ist ein modifiziertes BP-Verfahren, welches bei Eingabe der Lernaufgabe $\hat{\mathcal{L}} = \{(1, z_E^{max})\}$ die Kantengewichte entsprechend

$$\Delta W(u, v) = \begin{cases} \sigma \delta_v a_u & \text{falls } u = u_{in} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.7.4)$$

anpasst. Die Berechnung von δ_v erfolgt entsprechend dem BP-Verfahren:

$$\delta_v = \begin{cases} f'_v(net_v)(z_E^{max} - a_v) & \text{falls } v = u_{out} \\ f'_v(net_v) \sum_{w \in U_{j+1}} \delta_w W(v, w) & \text{falls } v \in U_S. \end{cases} \quad (2.7.5)$$

Mit diesem Verfahren werden die Gewichte iterativ so lange angepasst, bis eine der folgenden Haltebedingungen erfüllt wird:

1. Der Netzwerkfehler E (2.5.6) beträgt Null. Da das HydroNet nur ein einziges Ausgabeneuron besitzt und die Lernaufgabe nur aus einem einzigen Lernmuster besteht, ergibt sich für E :

$$E = \frac{1}{2}(z_E^{max} - a_{u_{out}})^2. \quad (2.7.6)$$

Wegen

$$E = 0 \Leftrightarrow a_{u_{out}} = z_E^{max}$$

kann diese Haltebedingung auch dargestellt werden als

$$a_{u_{out}} = z_E^{max}. \quad (2.7.7)$$

Das BP*-Verfahren stoppt also aufgrund des Netzwerkfehlers, wenn die Aktivierung des Ausgabeneurons gleich dem maximal zulässigen N-Austrag in den Vorfluter ist. Unabhängig davon ist jedoch das Problem NCP_A bereits gelöst, wenn die Netzwerkausgaben kleiner gleich dem zulässigen N-Austrag ist. Daher kann die Haltebedingung abgeschwächt werden:

$$a_{u_{out}} \leq z_E^{max}. \quad (2.7.8)$$

Um zu verhindern, dass sich der vom Verfahren ermittelte Gewichtsvektor nur asymptotisch an den gesuchten Gewichtsvektor annähert, wird eine kleine positive Konstante ϵ eingeführt und die Abbruchbedingung 2.7.8 wie folgt modifiziert:

$$a_{u_{out}} \leq z_E^{max} + \epsilon. \quad (2.7.9)$$

Durch Einführung von ϵ stoppt das Verfahren also dann, wenn sich der aktuelle Gewichtsvektor nahe genug an das Ergebnis angenähert hat. Hierbei ist zu beachten, dass sich ϵ nicht, wie bei BP-Netzen üblich, auf den Netzwerkfehler bezieht, sondern auf die Netzwerkausgabe. Diese Modifikation ermöglicht eine direkte Interpretation von ϵ als N-Menge.

2. Die Differenz zwischen der Netzwerkausgabe $a_{u_{out}}^{(t)}$ im Iterationsschritt t und der Netzwerkausgabe $a_{u_{out}}^{(t+1)}$ im darauf folgenden Iterationsschritt $t + 1$ ist kleiner als eine kleine Konstante ω :

$$|a_{u_{out}}^{(t)} - a_{u_{out}}^{(t+1)}| < \omega \quad (2.7.10)$$

Diese Bedingung sorgt dafür, dass das Verfahren abgebrochen wird, wenn sich die Netzwerkausgabe zwischen zwei Schritten des BP*-Verfahrens nicht oder nur sehr geringfügig ändert. Dieses Verhalten kann auftreten, wenn sich die Gewichtungskonfiguration asymptotisch dem Minimum der Fehlerfunktion annähert, aber die erste Abbruchbedingung nicht eintritt, weil der Wert der Fehlerfunktion deutlich größer als 0 ist.

Für ein HydroNet \mathcal{N} , eine obere Schranke für den N-Austrag z_E^{max} , einen Vektor optimaler N-Einträge \mathbf{n}^{opt} sowie kleine Konstanten ϵ und ω kann folgender Algorithmus BP*_A eine Lösung für die Problemstellung NCP_A ermitteln.

$\text{BP}_A^*(\mathcal{N}, z_E^{max}, \mathbf{n}^{opt}, \epsilon, \omega)$

- 1: Initialisiere die Düngekantengewichte: $\mathbf{w}^N := \mathbf{n}^{opt}$
- 2: $t = 0$
- 3: Berechne $a_{u_{out}}^{(t)}$
- 4: **repeat**
- 5: $t = t + 1$
- 6: Berechne einen neuen Gewichtsvektor \mathbf{w}^N gemäß (2.7.4)
- 7: Berechne $a_{u_{out}}^{(t)}$
- 8: **until** $(a_{u_{out}} - z_E^{max} \leq \epsilon)$ or $(|a_{u_{out}}^{(t-1)} - a_{u_{out}}^{(t)}| < \omega)$
- 9: return \mathbf{w}^N

Nach Beendigung des BP_A^* -Algorithmus entspricht der Vektor der Gewichte der Düngekanten \mathbf{w}^N dem gesuchten Entscheidungsvektor \mathbf{n} :

$$\mathbf{n} = \mathbf{w}^N.$$

Bei der Anwendung des BP_A^* -Algorithmus können Probleme auftreten, wie sie auch bei anderen Verfahren auf Grundlage von Gradientenabstieg zu finden sind (siehe S. 42). Dies kann in der Praxis in Abhängigkeit von Netzwerkkonfiguration und Startbedingungen des BP_A^* -Algorithmus dazu führen, dass das Ergebnis nur näherungsweise der Zielvorgabe entspricht.

Nachdem gezeigt wurde, wie ein modifiziertes BP^* -Verfahren zur Lösung der Problemstellung NCP_A eingesetzt werden kann, soll nun die Bearbeitung der Problemstellung NCP_B betrachtet werden. Gegeben ist in diesem Fall ein Budget z_K^{max} , welches eine obere Schranke für die Kostenfunktion z_K definiert. Gesucht ist eine Konfiguration von Stickstoffeinträgen \mathbf{n} , die

1. die Einhaltung des Budgets sicherstellt:

$$z_K(\mathbf{n}) \leq z_K^{max}$$

2. und dabei die Eintragsfunktion $z_E(\mathbf{n})$ minimiert.

Die Lösung dieses Problems kann durch eine geringfügige Modifikation des BP^* -Verfahrens erfolgen. Dazu wird das Lernverfahren zunächst für die Lernaufgabe $\hat{\mathcal{L}} = \{(1, 0)\}$ gestartet. Nach jedem Schritt der Gewichts Anpassung wird dann die Kostenfunktion für den neuen Vektor der Düngekantengewichte $z_K(\mathbf{w}^N)$ berechnet. Für den Fall

$$z_K(\mathbf{w}^N) < z_K^{max} \quad (2.7.11)$$

wird das BP^* -Verfahren fortgesetzt. Gilt (2.7.11) nicht, so wird die letzte Gewichts Anpassung rückgängig gemacht und das Verfahren gestoppt. Tritt dieser Fall nie ein, so stoppt das Verfahren erst, wenn eine der Haltebedingungen (2.7.8) oder (2.7.10) wahr wird. Zusammenfassend lässt sich somit feststellen, dass das Verfahren zur Lösung von NCP_B in folgenden Punkten von dem zur Lösung von NCP_A abweicht:

1. Der vorgegebene Zielwert für den Gesamteintrag in den Vorfluter entspricht nicht einem bestehenden Höchstwert (z_E^{max}), der sich aus Gesichtspunkten des Einzugsgebietsmanagements ergibt, sondern dem kleinsten möglichen Wert (0) für die Ausgabe des HydroNet. Aus diesem Grund wird auch nicht, wie in der ersten Haltebedingung des BP*-Verfahrens (S. 54), gefordert, dass die Netzwerkausgabe $a_{u_{out}}$ den Zielwert unterschreitet. Der Austrag muss stattdessen lediglich eine kleine Konstante ϵ unterschreiten.
2. Durch eine zusätzliche Haltebedingung wird sichergestellt, dass die Kosten, die sich aus dem aktuellen Vektor von Düngekantengewichten \mathbf{w}^N ergeben, nach jedem Schritt der Gewichts Anpassung überprüft werden. Bei Überschreitung vorgegebener maximaler Kosten z_K^{max} wird die letzte Gewichts Anpassung rückgängig gemacht und das Verfahren gestoppt.

Für ein HydroNet \mathcal{N} , ein Budget z_K^{max} , einen Vektor optimaler N-Einträge \mathbf{n}^{opt} sowie kleine Konstanten ϵ und ω kann folgender Algorithmus BP_B^* eine Lösung für die Problemstellung NCP_B ermitteln.

$BP_B^*(\mathcal{N}, z_K^{max}, \mathbf{n}^{opt}, \epsilon, \omega)$

- 1: Initialisiere die Düngekantengewichte: $\mathbf{w}^N := \mathbf{n}^{opt}$
- 2: $t = 0$
- 3: Berechne $a_{u_{out}}^{(t)}$
- 4: **repeat**
- 5: $t = t + 1$
- 6: $\mathbf{w}_{temp}^N = \mathbf{w}^N$
- 7: Berechne einen neuen Gewichtsvektor \mathbf{w}^N gemäß (2.7.4)
- 8: **if** $z_K(\mathbf{w}^N) \geq z_K^{max}$ **then**
- 9: return \mathbf{w}_{temp}^N
- 10: **end if**
- 11: Berechne $a_{u_{out}}^{(t)}$
- 12: **until** ($a_{u_{out}}^{(t)} \leq \epsilon$) or ($|a_{u_{out}}^{(t-1)} - a_{u_{out}}^{(t)}| < \omega$)
- 13: return \mathbf{w}^N

Analog der Lösung für NCP_A entspricht der resultierende Vektor der Düngekantengewichte \mathbf{w}^N dann dem gesuchten Entscheidungsvektor \mathbf{n} für NCP_B .

Nun soll betrachtet werden, welche Eigenschaften die Gewichts Anpassung gemäß dem BP*-Verfahren aufweist.

2.7.2 Eigenschaften des Lernverfahrens

Für ein Backpropagation-Netz mit einer festen Lernaufgabe $\hat{\mathcal{L}}$ kann gezeigt werden, dass das BP-Verfahren die folgende Fehlerfunktion mittels eines approximierten Gradientenabstiegs lokal minimiert (Rumelhart u. a. 1986):

$$E(\mathbf{w}) = \sum_{p \in \hat{\mathcal{L}}} E^{(p)} = \frac{1}{2} \sum_{p \in \hat{\mathcal{L}}} \sum_{v \in U_n} (t_v^{(p)} - a_v^{(p)})^2. \quad (2.7.12)$$

Dabei findet das BP-Verfahren im Allgemeinen nur ein lokales Minimum von E . Ob das gefundene Minimum lokal oder global ist, hängt – abgesehen von verschiedenen Lernparametern (z. B. Schrittweite oder Moment) und statischen Eigenschaften des HydroNet (z. B. Aktivierungsfunktionen) – entscheidend vom initialen Gewichtsvektor ab.

Im Fall des HydroNet existiert nur ein einziges Ausgabeneuron und die Lernaufgabe besteht nur aus einem einzigen Lernmuster. Daher ergibt sich für die Fehlerfunktion:

$$E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}(z_E^{max} - a_{u_{out}})^2. \quad (2.7.13)$$

Da das BP*-Verfahren nur die Gewichte \mathbf{w}^N der Düngekanten anpasst und alle übrigen Kanten unverändert lässt, gilt außerdem:

$$E(\mathbf{w}) = E(\mathbf{w}^N). \quad (2.7.14)$$

Die im letzten Abschnitt beschriebene Modifikation bei der Gewichts Anpassung im BP*-Verfahren wirft die Frage auf, ob die Fehlerfunktion E auch unter der Nebenbedingung minimiert wird, dass alle Gewichte bis auf die der Düngekanten konstant bleiben. Dass dies der Fall ist, wird bei genauerer Betrachtung der Gewichts Anpassung im BP-Verfahren schnell klar: Die Änderung eines einzelnen Gewichtes erfolgt vollkommen unabhängig von den Änderungen aller anderen Gewichte, da die Ermittlung der partiellen Fehler, und damit der Grundlage der Gewichts Anpassungen, vor der Anpassung aller Kantengewichte erfolgt. Ob ein Gewicht, z. B. das einer Grundwasserkante, geändert wird oder nicht, hat somit keinen Einfluss auf die Modifikationen der übrigen Gewichte. Auch der Zeitpunkt der Gewichts Anpassung – individuell für jedes einzelne Lernmuster oder gemeinsam für alle (vgl. Abschnitt 2.5.3.3) – spielt im Fall des BP*-Verfahrens keine Rolle, da hier nur ein einziges Muster berücksichtigt wird.

Einen weiteren Faktor, der das Ergebnis des BP-Verfahrens beeinflussen kann, ist der zugrunde liegende Netzwerktyp. Gegenüber Backpropagation-Netzen fehlen dem HydroNet der schichtartige Aufbau und die Einschränkung, dass nur Kanten zwischen Neuronen aufeinanderfolgender Schichten zugelassen sind. Aber auch diese Modifikation spielt für das BP-Verfahren keine Rolle, da nicht die Schichtenstruktur, sondern die daraus resultierende Zyklenfreiheit die wesentliche Eigenschaft des Backpropagation-Netzes ist (Nauck u. a. 1996). Diese hingegen ist im HydroNet wegen der hydrologischen Topologien, die der Netzwerkstruktur zugrunde liegen, in jedem Fall gegeben.

Um weitere Aussagen über das Ergebnis des BP*-Verfahrens machen zu können, werden zunächst einige spezielle Eigenschaften des HydroNet zusammengefasst:

1. Alle Kantengewichte sind positiv, da diese entweder Stoffmengen (Düngekanten) oder Stoffmengenanteile (Interflow- und Grundwasserkanten) repräsentieren:

$$W : U \times U \rightarrow \mathbb{R}^+. \quad (2.7.15)$$

2. Die Aktivierungsfunktionen aller Neuronen sind Abbildungen von \mathbb{R}^+ in \mathbb{R}^+ . Dies ergibt sich

einerseits aus den positiven Kantengewichten (2.7.15), andererseits aus den speziellen Eigenschaften der eingesetzten Aktivierungsfunktionen (Abschnitt 2.6.1.3). Daraus folgt, dass die Aktivierungen aller Neuronen stets positiv sind:

$$\forall u \in U : a_u \geq 0. \quad (2.7.16)$$

3. Die Aktivierungsfunktionen f_u aller Neuronen $u \in U$ sind monoton steigend:

$$\forall u \in U : f'_u(net_u) \geq 0. \quad (2.7.17)$$

Für die Aktivierungsfunktion des Ein- und Ausgabeneurons ist diese Aussage trivial. Um diese Eigenschaft aber für die Aktivierungsfunktionen der inneren Neuronen zu begründen, muss die durch sie dargestellte N-Austragsfunktion genauer betrachtet werden. Hier wird idealisiert angenommen, dass eine Erhöhung des N-Eintrags in eine räumliche Einheit immer zu einem gleichbleibenden oder erhöhten N-Austrag führt. Diese Annahme ist vor allem dann sinnvoll, wenn der N-Austrag – wie bei der Ableitung der Aktivierungsfunktionen – einzig als Funktion des N-Eintrags dargestellt wird und alle anderen Einflussfaktoren als konstant angesehen werden (Abschnitt 2.6.1.3).

Um weitere Aussagen über das BP*-Verfahren machen zu können, ist es sinnvoll, die Menge der zu berücksichtigenden Vektoren von Düngekantengewichten eines HydroNet in folgende Teilmengen zu untergliedern:

$$\mathbf{W}_{\leq}^N =_{\text{def}} \{ \mathbf{w}^N : a_{u_{out}} \leq z_E^{max} \}, \quad (2.7.18)$$

$$\mathbf{W}_{\geq}^N =_{\text{def}} \{ \mathbf{w}^N : a_{u_{out}} \geq z_E^{max} \}. \quad (2.7.19)$$

Schnell wird klar, dass für die Lösung von NCP_A nur die Menge \mathbf{W}_{\geq}^N von Interesse ist, da zu Beginn des Verfahrens wegen (2.7.2) und (2.6.4)

$$a_{u_{out}} > z_E^{max}$$

gilt und das Verfahren für

$$a_{u_{out}} \leq z_E^{max}$$

wegen der ersten Haltebedingung (2.7.9) anhält.

Auf dieser Grundlage lässt sich nun der folgende Satz formulieren. (*Anmerkung:* im Weiteren gilt folgende Abkürzung: $\mathbf{w}_v^N := W(u_{in}, v)$).

Satz 1 (Monotonieverhalten von E)

$$\forall v \in U_S : \frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}_v^N} \begin{cases} \geq 0 & \text{falls } \mathbf{w}^N \in \mathbf{W}_{\geq}^N \\ \leq 0 & \text{falls } \mathbf{w}^N \in \mathbf{W}_{\leq}^N. \end{cases} \quad (2.7.20)$$

BEWEIS

Um eine Aussage über die Monotonie der Fehlerfunktion in den Gewichten der Düngekannten machen zu können, wird ihr Gradient mit Hilfe der Kettenregel dargestellt:

$$\forall v \in U_S : \frac{\partial E}{\partial \mathbf{w}_v^N} = \frac{\partial E}{\partial a_{u_{out}}} \frac{\partial a_{u_{out}}}{\partial \mathbf{w}_v^N} \quad (2.7.21)$$

Für den zweiten Faktor kann wegen (2.7.16) und (2.7.17) festgestellt werden, dass die Ausgabe $a_{u_{out}}$ des Ausgabeneurons eine monoton steigende Funktion der Gewichte der Düngekannten ist:

$$\forall v \in U_S : \frac{\partial a_{u_{out}}}{\partial \mathbf{w}_v^N} \geq 0. \quad (2.7.22)$$

Nun muss noch der erste Term untersucht werden. Der Verlauf von E in der Aktivierung $a_{u_{out}}$ des Ausgabeneurons lässt sich wegen (2.7.13) wie folgt beschreiben:

$$\frac{\partial E}{\partial a_{u_{out}}} = a_{u_{out}} - z_E^{max} \begin{cases} \geq 0 & \text{falls } \mathbf{w}^N \in W_{\geq}^N \\ \leq 0 & \text{falls } \mathbf{w}^N \in W_{\leq}^N \end{cases} \quad (2.7.23)$$

Zusammen mit (2.7.22) folgt daraus (2.7.20).

□

Aus Satz 1 können folgende Schlussfolgerungen über die für das BP*-Verfahren relevante Menge \mathbf{W}_{\geq}^N von Gewichtskonfigurationen gezogen werden:

- E besitzt in \mathbf{W}_{\geq}^N nur ein (möglicherweise lokales) Minimum E^{min} . Die Urbildmenge von E^{min} kann sowohl aus einer einzelnen Konfiguration von Düngekanntengewichten bestehen, als auch aus einer Menge solcher Konfigurationen.
- Da das BP*-Verfahren einen Gradientenabstieg in E realisiert, nähert es sich bei geeigneter Wahl der Verfahrensparameter einem Element der Urbildmenge von E^{min} an. Probleme stellen lediglich mögliche Plateaus der Fehlerfunktion dar (S. 42), die zu einem vorzeitigen Ansprechen der zweiten Haltebedingung des BP*-Verfahrens (S. 54) führen und somit ein Auffinden von E^{min} verhindern können.
- Da das BP*-Verfahren einen Gradientenabstieg in E realisiert und E in den Gewichten aller Düngekannten monoton steigend ist, wird keines dieser Gewichte während des BP*-Verfahrens

erhöht.

Stoppt der BP*-Algorithmus, so können zwei Fälle unterschieden werden:

1. Die erste Haltebedingung des BP*-Verfahrens ist wahr geworden. Es wurde ein Urbild des Minimums der Fehlerfunktion E_{min} mit

$$E^{min} \approx 0$$

gefunden, d. h. die erste Bedingung (2.7.1) von NCP_A ist erfüllt.

2. Die zweite, aber nicht die erste Haltebedingung ist wahr geworden, das Ergebnis ist keine Lösung für NCP_A . Dies kann zwei Ursachen haben:
 - a) Das Verfahren stoppt auf einem Plateau der Fehlerfunktion. Durch Modifikationen der Verfahrensparameter kann dieses Problem unter Umständen umgangen werden.
 - b) Die Gewichte aller Kanten im HydroNet sind positiv (Definition 2.6.1). Daher können die Gewichte der Düngekanten nicht weiter verringert werden, die Kapazität zur Reduktion des N-Austrags ist somit ausgeschöpft. In diesem Fall existiert keine Lösung für das NCP_A .

In der Problemstellung NCP_A wurde außerdem gefordert, dass die Kosten $z_K(\mathbf{n})$, die aus dem gefundenen Entscheidungsvektor \mathbf{n} resultieren, minimal sind. Die Kosten sind definiert als die Summe der Gewichtsänderungen aller Düngekanten, die aus \mathbf{n} resultieren (Definition 2.2.6). Um eine Aussage darüber zu treffen, ob auch diese Forderung durch das BP*-Verfahren erfüllt wird, werden wieder zwei Fälle unterschieden:

1. Das Urbild des Minimums von E besteht aus einem einzigen Punkt:
In diesem Fall sind auch die Kosten $z_K(\mathbf{n})$ minimal, da kein anderer Gewichtsvektor \mathbf{w}^N existiert, für den E minimal ist.
2. Das Urbild des Minimums von E besteht aus einer Menge von Punkten:
Für diesen Fall kann von vornherein keine Aussage über die Qualität der Lösung bezüglich der Kosten getroffen werden. Ob die Kosten $z_K(\mathbf{n})$ minimal sind, hängt sowohl von den Aktivierungsfunktionen als auch den Parametern des BP*-Verfahrens ab. Damit ist das Ergebnis des BP*-Verfahrens ebenso von individuellen Rahmenbedingungen abhängig wie das des BP-Verfahrens. Eine Erörterung der Eigenschaften des BP*-Verfahrens und den Einfluss verschiedener Verfahrensparameter auf die Kosten erfolgt im Kapitel 3.

2.8 Praktische Überlegungen zum HydroNet

Im letzten Abschnitt wurde gezeigt, wie sich die Gebietseigenschaften, die einem NCP zugrunde liegen, mit Hilfe eines HydroNet darstellen lassen und wie mit Hilfe des BP*-Verfahrens Annäherungen an Lösungen für die Problemstellungen NCP_A und NCP_B gefunden werden können. Nun

soll auf einige praxisrelevante Aspekte bei der Erzeugung des HydroNet und der Durchführung des BP*-Verfahrens näher eingegangen werden.

2.8.1 Neuronen, Netzwerkstruktur und Kantengewichte

Um ein hydrologisches Einzugsgebiet zusammen mit den für den Stickstofftransport und Stickstoffabbau relevanten Prozessen durch ein HydroNet abzubilden, werden Informationen benötigt über

1. die räumliche Diskretisierung des Einzugsgebietes,
2. die topologischen Beziehungen zwischen den räumlich diskreten Objekten sowie
3. die Beziehung zwischen dem Eintrag von Stickstoff in ein Objekt sowie dem Austrag aus diesem Objekt.

Die räumliche Diskretisierung ergibt sich bereits aus der Problemstellung. Diese beinhaltet die Suche nach einer optimalen Konfiguration von Stickstoffeinträgen auf einzelnen landwirtschaftlichen Nutzflächen (Schläge).

Sowohl die topologischen Beziehungen als auch die zur Darstellung der Beziehungen zwischen Eintrag und Austrag von Stickstoff notwendigen Daten können jedoch nicht im Gelände gemessen werden. Daraus ergibt sich die Notwendigkeit, diese mit Hilfe eines geeigneten Modells aus im Gelände messbaren Parametern zu ermitteln. Da die Ergebnisse der Modellierung für alle räumlichen Einheiten individuell ausgewiesen werden sollen, muss das eingesetzte Modell in der Lage sein, flächendistributiv – also unter Berücksichtigung der einzelnen räumlichen Einheiten des Einzugsgebietes – zu arbeiten. Hinzu kommt, dass bereits bei leicht reliefiertem Gelände laterale Transportprozesse einen großen Einfluss auf die Dynamik der den Stickstoff beeinflussenden Prozesse im Boden ausüben können. Das Modell muss in der Lage sein, die daraus resultierenden topologischen Beziehungen darzustellen, damit diese später auf das HydroNet übertragen werden können.

2.8.2 Aktivierungsfunktionen

Da es im Allgemeinen nicht möglich ist, die vom Modell berechnete N-Austragsfunktion in einer expliziten, differenzierbaren Form darzustellen, muss für die Aktivierungsfunktion eine differenzierbare Annäherung an diese N-Austragsfunktion gewählt werden. Als Basis für diese Annäherung dient eine Menge von Stützstellen der N-Austragsfunktion, welche durch das Modell ermittelt werden müssen. In den meisten Fällen ist es jedoch aufgrund fehlender Daten nicht möglich, diese vom Modell berechneten Stützstellen zu validieren. Hieraus ergibt sich eine weitere Anforderung an das Modell. Dieses muss nach einer initialen Kalibrierung mit gemessenen Daten in der Lage sein, auch die Ausgaben für völlig unbekannte Eingabedaten mit ausreichender Genauigkeit zu ermitteln. Solche Modelle arbeiten meist mehr oder weniger physikalisch basiert und lassen sich somit in die Klasse der *White-Box-* oder *Gray-Box-Modelle* einordnen.

Um die Stützstellen zu ermitteln, werden N-Eintragsszenarien für das Modell festgelegt, welche so gewählt werden, dass sie den angestrebten Definitionsbereich der N-Austragsfunktion vollständig und

möglichst gleichmäßig abdecken. Außerdem muss den Szenarien eine repräsentative, durchschnittliche Nutzungsform der räumlichen Einheiten zugrunde gelegt werden. Damit wird sichergestellt, dass die resultierenden N-Austragsfunktionen unabhängig von einer individuellen Landnutzung, die ja vom HydroNet nicht berücksichtigt wird, die Bandbreite der Nutzungsformen im betrachteten Gebiet vollständig widerspiegeln.

Nachdem das Modell mit Hilfe im Gebiet gemessener Daten parametrisiert und kalibriert wurde, können die N-Austräge aller räumlichen Einheiten für die N-Eintragsszenarien ermittelt werden. Das Ergebnis dieser Modellierung ist für jede räumliche Einheit $s \in S$ eine Menge P_s von Stützstellen mit

$$P_s = \{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\} \quad (x_1, \dots, x_m, y_1, \dots, y_m \in \mathbb{R}^+). \quad (2.8.1)$$

Für ein Paar (x_i, y_i) ($1 \leq i \leq m$) bezeichnet dabei x_i den N-Gesamteintrag und y_i den N-Gesamtaustrag einer räumlichen Einheit s . Mit Hilfe dieser Stützstellen kann anschließend eine N-Austragsfunktion $r_s : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ approximiert werden. Zur Ermittlung von r_s bieten sich unterschiedliche Verfahren an. Zwei von ihnen sollen hier erläutert werden.

2.8.2.1 Polylines

Ein Ansatz zur Darstellung der N-Austragsfunktion ist die lineare Interpolation/Extrapolation der gegebenen Stützstellen (*Polyline*). Für eine Menge von Stützstellen P_s mit mindestens zwei Elementen werden für N-Einträge aus dem Intervall $[x_i, x_{i+1})$ ($i \in 1, \dots, m-1$) die N-Austräge durch eine lineare Funktion f_i interpoliert, so dass gilt:

$$\begin{aligned} f_i(x) &= a_i x + b_i \quad \text{mit} \\ a_i &= \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \quad \text{und} \\ b_i &= y_i - a_i x_i. \end{aligned} \quad (2.8.2)$$

Insbesondere gilt dann:

$$f_i(x_i) = y_i \quad (1 \leq i \leq m).$$

Die Funktion r_s wird nun wie folgt berechnet:

$$r_s(x) = \begin{cases} f_1(x) & \text{falls } x \in [x_1, x_2), \\ \vdots & \\ f_{m-1}(x) & \text{falls } x \in [x_{m-1}, x_m]. \end{cases} \quad (2.8.3)$$

Abbildung 2.11 (links) zeigt ein Beispiel dieses Funktionstyps zusammen mit fünf Stützstellen.

Der Definitionsbereich der Funktion r_s ist gegeben durch

$$\mathbb{D}_{r_s} = [x_1, x_m] \subset \mathbb{R}^+ \quad (x_1 > 0).$$

Die Stützstellen sollten von vornherein so gewählt werden, dass der angestrebte Definitionsbereich vollständig abgedeckt wird. Unter Umständen ist dies aber nicht möglich, z. B. weil das verwendete Modell nur N-Einträge innerhalb festgelegter Ober- und Untergrenzen zulässt oder weil im Vorfeld nicht bekannt ist, wie groß die zu erwartenden N-Gesamteinträge für ein einzelnes Neuron sein werden. In solchen Fällen ist es sinnvoll, für Eingaben außerhalb des durch Stützstellen abgedeckten Intervalls Standardannahmen für den N-Austrag zu treffen, z. B.

$$r_s(x) = \begin{cases} f_0(x) & \text{falls } x \in [0, x_1), \\ f_1(x) & \text{falls } x \in [x_1, x_2), \\ \vdots & \\ f_{m-1}(x) & \text{falls } x \in [x_{m-1}, x_m], \\ f_m(x) & \text{falls } x > x_m. \end{cases} \quad (2.8.4)$$

mit

$$\begin{aligned} f_0(x) &= y_1 \\ f_m(x) &= x + y_m - x_m. \end{aligned} \quad (2.8.5)$$

Für $x \in [0, x_1]$ wird also angenommen, dass der N-Austrag konstant bleibt, weil z. B. ein Bodenspeicher noch nicht gefüllt ist und zusätzlicher Stickstoff in der räumlichen Einheit zwischengepuffert werden kann. Für $x > x_m$ ist die N-Abbaukapazität der Einheit erschöpft, zusätzlich eingetragener Stickstoff wird in vollem Umfang wieder ausgetragen.

Für die Darstellung der N-Austragsfunktion außerhalb des durch das Modell beschriebenen Intervalls sind weitere Annahmen denkbar. Auf Alternativen zu der hier vorgestellten Variante wird in Kapitel 3 eingegangen.

2.8.2.2 Polynome

Eine alternative Repräsentation der N-Austragsfunktion ist durch die Darstellung als Polynom möglich, welches mit Hilfe von Regressionsverfahren ermittelt werden kann. Solche Verfahren basieren häufig auf der Minimierung der Summe der Fehlerquadrate. Mit diesem Ansatz können beispielsweise Polynome n -ter Ordnung oder Exponentialfunktionen an gegebene Stützstellen angenähert werden.

Beim Einsatz von Polynomen ist zu berücksichtigen, dass der Fehler der resultierenden Funktion für Eingaben außerhalb des durch das Modell beschriebenen Intervalls bei der Wahl eines ungeeigneten Funktionstyps sehr groß werden kann. In Abschnitt 2.6.1.3 wurde bereits auf einige grundlegende Eigenschaften der Beziehung zwischen N-Eintrag und N-Austrag eingegangen. Bei der Auswahl des Funktionstyps muss daher insbesondere darauf geachtet werden, dass die Funktion die Tendenz der

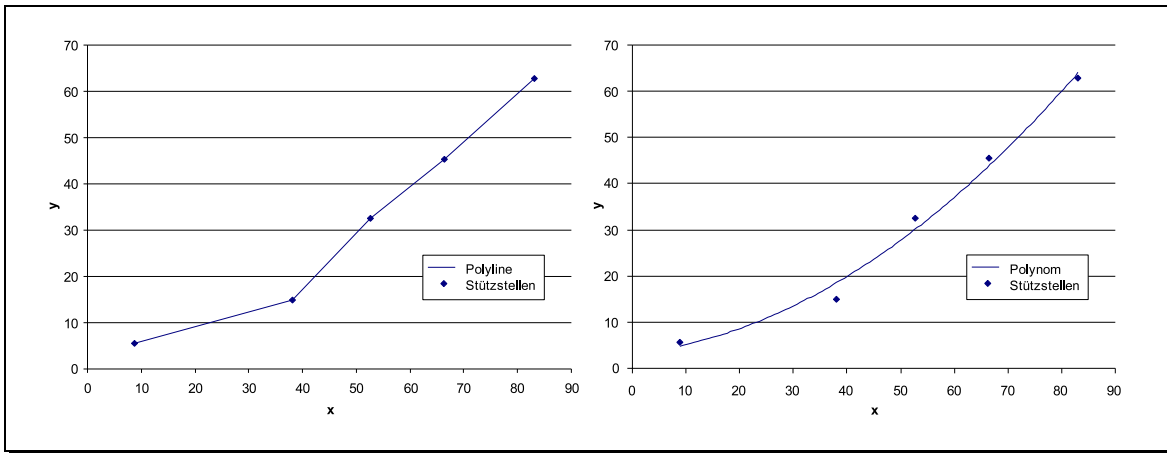


Abbildung 2.11: Lineare Interpolation (links) und polynomiale Regression zweiter Ordnung (rechts) über Stützstellen einer N-Austragsfunktion

N-Austräge besonders für große N-Einträge oberhalb von n_s^{sat} (vgl. Abbildung 2.9) gut wiedergeben kann.

Die allgemeine Form einer polynomiellen N-Austragsfunktion n -ten Grades lautet:

$$r_s(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i. \quad (2.8.6)$$

Ziel der polynomialen Regression ist es, die Koeffizienten a_0, \dots, a_n so zu bestimmen, dass die Summe S der Fehlerquadrate mit

$$S := \sum_{i=1}^m (y_i - r_s(x_i))^2 \quad (2.8.7)$$

minimal wird. Dazu müssen die partiellen Ableitungen der Fehlerquadrate gleich 0 sein:

$$\frac{\partial S}{\partial a_i} = 0 \quad (0 \leq i \leq n). \quad (2.8.8)$$

Um die Koeffizienten a_0, \dots, a_n zu bestimmen, muss folgendes Gleichungssystem mit $n + 1$ Norma-

lengleichungen gelöst werden (Stöcker 1993):

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^m y_i x_i^0 &= a_0 \sum_{i=1}^m x_i^0 + a_1 \sum_{i=1}^m x_i^1 + \cdots + a_n \sum_{i=1}^m x_i^n \\
 \sum_{i=1}^m y_i x_i^1 &= a_0 \sum_{i=1}^m x_i^1 + a_1 \sum_{i=1}^m x_i^2 + \cdots + a_n \sum_{i=1}^m x_i^{n+1} \\
 &\vdots \\
 \sum_{i=1}^m y_i x_i^n &= a_0 \sum_{i=1}^m x_i^n + a_1 \sum_{i=1}^m x_i^{n+1} + \cdots + a_n \sum_{i=1}^m x_i^{n+n}.
 \end{aligned} \tag{2.8.9}$$

Durch Lösung dieses Gleichungssystems können die Parameter a_0, \dots, a_n berechnet werden. Die Anzahl der Stützstellen m muss dabei stets größer sein als der Grad n des angenäherten Polynoms. Zur Darstellung der N-Austragsfunktion scheinen Polynome zweiter Ordnung besonders gut geeignet zu sein. Abbildung 2.11 (rechts) zeigt solch ein Polynom, welches an fünf Stützstellen angenähert wurde.

2.8.2.3 Gegenüberstellung

Sowohl Polynome als auch Polyline weisen grundsätzlich alle Merkmale auf, die für den Einsatz als Aktivierungsfunktion in einem HydroNet vorausgesetzt werden. Dennoch lassen sich verschiedene für den Einsatz im HydroNet relevante Unterschiede feststellen:

1. Zunächst muss betrachtet werden, wie sich beide Funktionstypen zur Abbildung der N-Austragsfunktion eignen. Polyline sind hier in der Lage, vorgegebene Stützstellen dieser Funktion fehlerfrei zu repräsentieren. Die lineare Interpolation des Austrags für unbekannte Einträge zwischen bekannten Stützstellen erscheint hier sinnvoll, da genauere Informationen über den Verlauf der N-Austragsfunktion nicht existieren.

Um dagegen eine fehlerfreie Wiedergabe gegebener Stützstellen auch mit Polynomen sicherzustellen, müssten deren Grade ebenso groß gewählt werden wie die Anzahl der Stützstellen. Solche Polynome sind jedoch im Allgemeinen nicht in der Lage, die Austräge für unbekannte Einträge außerhalb der Stützstellen erwartungsgetreu wiederzugeben. Polynome mit festem (z. B. zweiten) Grad können im Gegenzug auch bekannte Stützstellen nur annähern.

2. Ein weiteres Unterscheidungsmerkmal ist die Eignung beider Funktionstypen für den Einsatz in Gradientenabstiegsverfahren wie dem BP*-Algorithmus. Die dafür benötigte Ableitung der Aktivierungsfunktionen kann bei Verwendung von Polyline nur für das offene Intervall zwischen zwei benachbarten Stützstellen berechnet werden. Die an den Stützstellen selbst auftretenden Unstetigkeiten und die daraus resultierenden Probleme bei der Berechnung der ersten Ableitung können zwar durch Vereinfachungen gelöst werden (Ableitung an der Stützstelle entspricht der Ableitung des Intervalls links bzw. rechts der Stützstelle), dennoch stellt sich die

Frage, welche Auswirkungen sich aus dem resultierenden unstetigen Verlauf der ersten Ableitung von Polylines für das BP*-Verfahren ergeben.

Bei Verwendung von Polynomen treten die genannten Probleme wegen der Stetigkeit über den gesamten Definitionsbereich nicht auf.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass eine möglichst detailgetreue Abbildung der N-Austragsfunktionen gegenüber möglichen Problemen während des BP*-Verfahrens im Vordergrund steht. Daher liegt die Vermutung nahe, dass Polylines besser zur Repräsentation dieser Beziehung geeignet sind als Polynome. Wie sich der Nachteil der Unstetigkeit an den Stützstellen auf das BP*-Verfahren auswirkt, kann a priori nur schwer abgeschätzt werden. Eine abschließende Bewertung der Eignung beider Funktionstypen für den vorliegenden Anwendungsfall erfolgt daher erst im nachfolgenden Kapitel (Abschnitte 3.4.3 und 3.6.1). Hier werden sowohl die Qualität der Abbildung der N-Austragsfunktion auf Basis beider Funktionstypen als auch die zugehörigen Ergebnisse aus dem BP*-Verfahren gegenübergestellt.

3 Anwendung: Das Talsperrensystem Weida-Zeulenroda

In grundwasserarmen Gebieten dienen Talsperren häufig als wesentliche Quelle für die Wasserversorgung der Bevölkerung. Dieser Sachverhalt ist auch in der Mittelgebirgslandschaft Thüringens gegeben. Aus diesem Grund betreibt die Thüringer Talsperrenverwaltung (ThürTV) 11 Trinkwassertalsperren in ganz Thüringen, deren großflächige Wasserschutzgebiete eine Vielzahl von Nutzungskonflikten bedingen. Da diese Wasserschutzgebiete größtenteils besiedelt sind oder landwirtschaftlich genutzt werden, besteht die Notwendigkeit, die verschiedenen Interessen gegeneinander abzuwägen und den Schutz der Wasserressourcen konsequent und effektiv zu gestalten.

Besonders konfliktbehaftet ist in Thüringen das Talsperrensystem Weida-Zeulenroda mit einer Gesamtfläche von 249 km². Das zugehörige Wasserschutzgebiet wird zu knapp zwei Dritteln landwirtschaftlich genutzt (Arbeitsgemeinschaft Trinkwassertalsperren e. V. 2000), wobei der Ackerbau deutlich überwiegt. Eine 1998 in Kraft getretene Wasserschutzgebietsverordnung regelt die Möglichkeiten und Grenzen der landwirtschaftlichen Aktivitäten im Sinne des Gewässerschutzes. Allein der hohe Anteil an ackerbaulich genutzten Flächen führt jedoch weiterhin zu einer latenten Gefahr des Eintrages von Nährstoffen, hier ist insbesondere Stickstoff zu nennen. Die Böden im Einzugsgebiet der genannten Talsperren begünstigen die Auswaschung von Nitrat mit dem oberflächennahen Zwischenabfluss in die Fließgewässer. Dies führte in der Vergangenheit zu Nitratkonzentrationen von mehr als 50 mg l⁻¹ im Rohwasser und damit zur Überschreitung des Grenzwertes der Trinkwasserverordnung.

Die Thüringer Talsperrenverwaltung und die betroffenen Landwirtschaftsbetriebe bemühen sich, durch kooperative Maßnahmen, die teilweise über die gesetzlichen Anforderungen hinausgehen, den Eintrag von Nährstoffen in die Gewässer zu minimieren. Dazu gehören eine angepasste Fruchtfolgegestaltung, die Nutzungsänderung auf bestimmten Flächen und, als zentraler Bestandteil, die Förderung von Zwischenfruchtanbau durch die Thüringer Talsperrenverwaltung. Fachliches Ziel der geförderten landwirtschaftlichen Maßnahmen ist die langfristige Verbesserung und Sicherung der Wasserqualität bei völligem Erhalt der landwirtschaftlichen Erwerbsstruktur.

Dem Gebot zur Minimierung der Kosten folgend, bedeutet der effektive Einsatz der Maßnahmen einerseits, dass diese möglichst auf Flächen zu konzentrieren sind, auf welchen sie ihre Wirkung entfalten können. Andererseits dürfen die landwirtschaftlichen Unternehmen nicht mit Auflagen belastet werden, die keine oder nur eine geringe Wirksamkeit bezüglich des Gewässerschutzes erreichen. Im administrativen Bereich kommt hinzu, dass die Thüringer Talsperrenverwaltung als Anstalt des öffentlichen Rechts zur Gleichbehandlung aller Partner verpflichtet ist. Aus der unterschiedlichen Akzeptanz und Attraktivität der geförderten Maßnahmen ergibt sich ein weiteres Konfliktfeld, da die landwirtschaftlichen Betriebe um die Förderbeträge konkurrieren.

Um das skizzierte Problemfeld zu bearbeiten und so Unterstützung bei der Ermittlung von Anbauflächen zu leisten, auf denen Maßnahmen, die auf die Verringerung des N-Eintrags in das Talsperrensystem zielen, eine optimale Wirkung entfalten, sollte das im Kapitel 2 beschriebene Verfahren angewandt werden. Im Folgenden soll nach einer genaueren Charakterisierung des Einzugsgebietes des Talsperrensystems Weida-Zeulenroda-Lössau sowie einer Beschreibung des eingesetzten Stofftransportmodells die Anwendung des beschriebenen Optimierungsverfahrens dokumentiert und die Ergebnisse präsentiert werden.

3.1 Charakterisierung des Einzugsgebietes

3.1.1 Geografische Einordnung

Die nachfolgenden Angaben zur Charakterisierung des Einzugsgebietes wurden, wenn nicht anders gekennzeichnet, der Dissertation von Fink (2004) entnommen.

Das Untersuchungsgebiet, für das die im Kapitel 2 beschriebenen Verfahren angewandt werden sollen, ist ca. 30 km südlich von Gera, an der Grenze zwischen Thüringen und Sachsen gelegen und umfasst das Einzugsgebiet der Talsperren Zeulenroda und Weida (Abbildung 3.1). Die Gesamtfläche beträgt 163 km², wobei 139,65 km² auf das Einzugsgebiet der Talsperre Zeulenroda entfallen. Etwa 70 % der Fläche des EZG sind den Thüringer Landkreisen Saale-Orla-Kreis und Greiz zugehörig, während die verbleibenden 30 % zum sächsischen Vogtlandkreis gehören.

Der Naturraum des Untersuchungsgebietes lässt sich dem östlichen Teil des Thüringer Schiefergebirges zuordnen. Er wird morphologisch durch den Schiefergebirgsrumpf mit einem ausgeprägten Hochflächencharakter und einzelnen Härtlingsrücken bestimmt. Die dominierende Talform ist das Kerb- bzw. Kerbsohlental. Im südlichen Teil des Einzugsgebietes sind die Täler breiter und eher als Muldentäler ausgebildet (Schultze 1955). Die Höhe des Untersuchungsgebietes schwankt zwischen 315 m über dem Meeresspiegel am Fuße der Talsperre Weida und 565 m über dem Meeresspiegel im südlichen Teil.

3.1.2 Lithologische und pedologische Verhältnisse

Die Gesteinsstruktur im Untersuchungsgebiet ist entsprechend der Lage sehr differenziert. Vorherrschende Gesteine auf den genannten Hochflächen sind Ton- und Kieseliefer kambrischen oder silurischen Ursprungs. An den Flanken sind dagegen devonische Schiefer, Grauwacken, Breccien und Quarzite zu finden. Die Täler des Talsperreneinzugsgebietes sind mit holozänen Auesedimenten wie Schotter oder Auelehm verfüllt. Abbildung 3.2 zeigt die Tektonik und Landschaftsform im östlichen Thüringer Schiefergebirge.

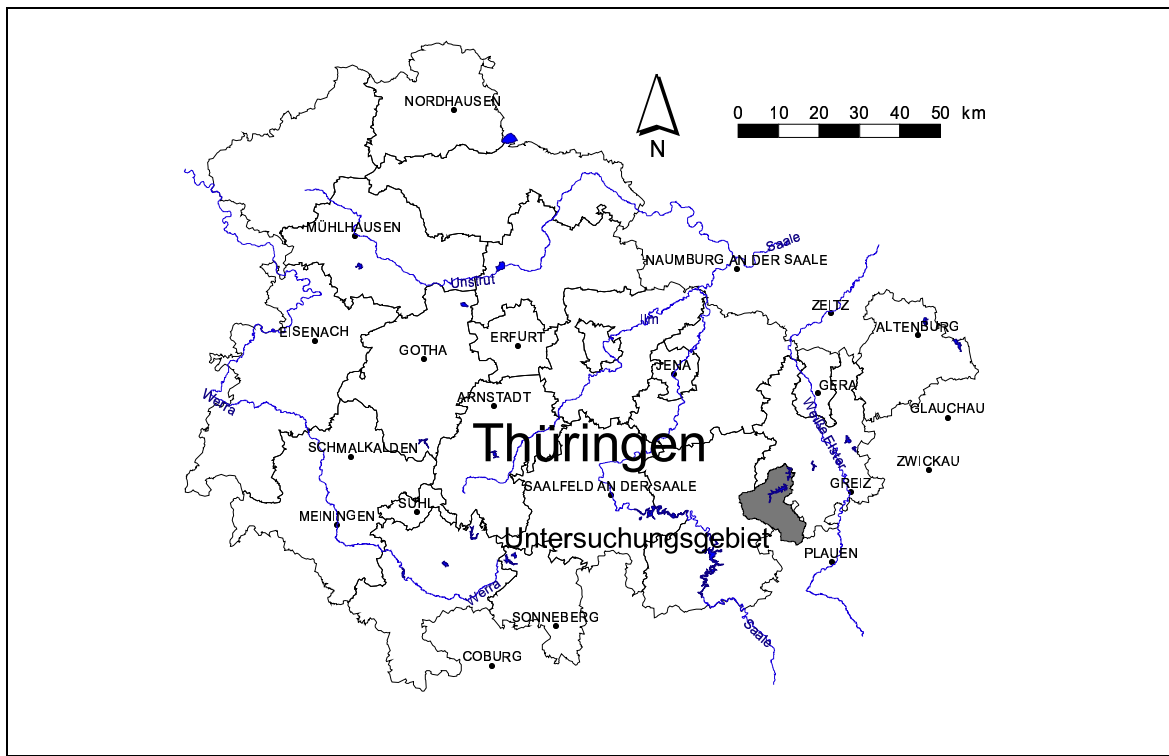


Abbildung 3.1: Lage des Einzugsgebietes

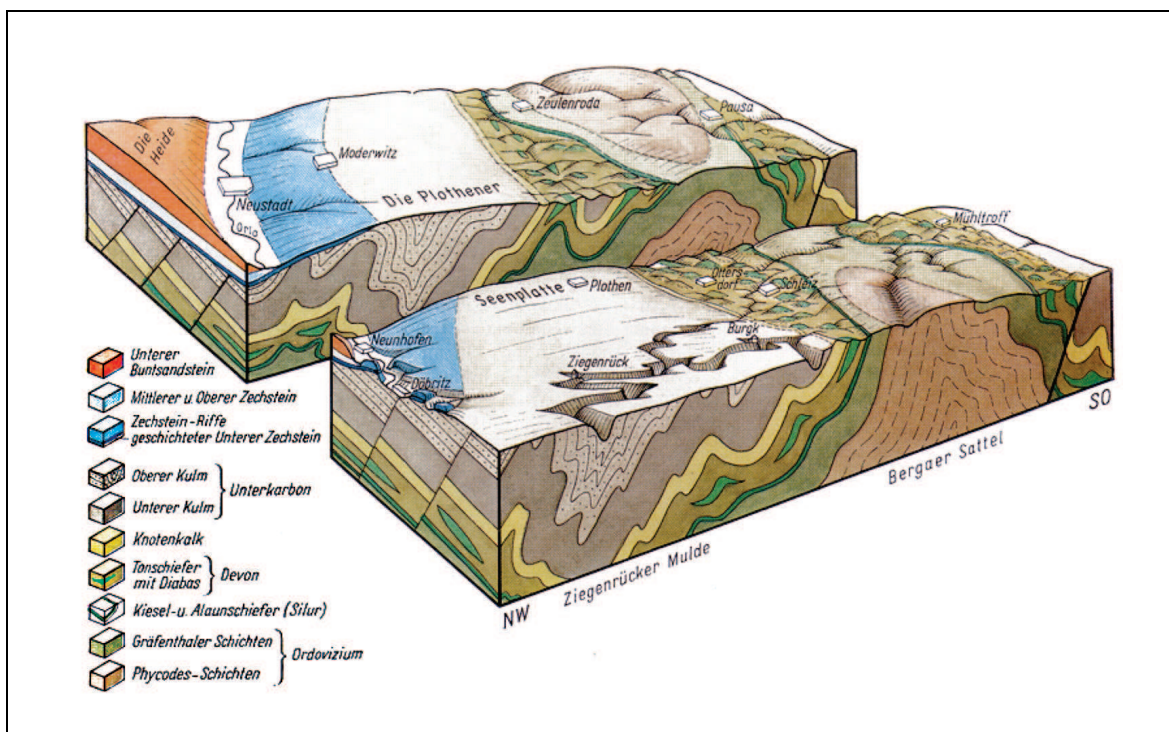


Abbildung 3.2: Schematisches Blockbild zur Tektonik und Landschaftsform im östlichen Thüringer Schiefergebirge (Wagenbreth und Steiner 1990)

Tabelle 3.1: Anteile im Gebiet vorhandener Bodenklassen nach den Leitbodenformen Thüringens (Rau u. a. 1995)

Symbol	Bezeichnung	Anteil [%]
lg1	Lehm, steinig – grusig (Schieferschutt)	33
lg2	sandiger Lehm, steinig (Schieferschutt, Quarzit)	11
lg3	Lehm, steinig – grusig (Schieferschutt, Diabas)	16
lg4	Skelettboden, lehmig (Steilhänge im Schiefergebiet)	1
lg5	Lehm, tonig – Staugley (Schieferzersatz)	17
lglö	Lehm, lössartig – Staugley (Braunerde) über Schiefergestein	12
h21	Lehm – Vega (Auelehm über Sand-Kies)	2
h22	Lehm – Vega (Auelehm in Nebentälern)	1
h32	sandiger Lehm - Vega (Auelehm in Nebentälern)	5
h4	Lehm, tonig - Anmoorgley (Schieferzersatz)	2

Die Böden des Untersuchungsgebietes sind vom Ausgangsgestein geprägt, aus dem sich vor allem Böden mit einer lehmigen Textur entwickelt haben. Darüber hinaus spielt auch der sedimentierte Löss eine erhebliche Rolle. In Tabelle 3.1 ist ein Überblick über die im Gebiet vorkommenden Bodenklassen dargestellt.

Das Ertragspotenzial der Böden ist mittel bis gering. Dies ist darauf zurückzuführen, dass entweder die Bodenmächtigkeit gering ist oder Probleme mit Staunässe auftreten. Die ertragreichsten Böden finden sich in den Klassen lg3 und lglö (siehe Abbildung 3.3).

3.1.3 Klima

Das Klima des Einzugsgebietes des Talsperrensystems Zeulenroda-Weida kann als gemäßigt, immerfeucht und sommerkühl bezeichnet werden (Thiel 2000). Durch die Leelage zum Thüringer Wald und Harz sind die Niederschläge mit ca. 690 mm niedrig und ihre Verteilung im Gebiet relativ homogen (Abbildung 3.4). Sie nehmen mit zunehmender Geländehöhe nach Süden hin zu. Die Durchschnittstemperaturen liegen mit ca. 7 °C im unteren Bereich bundesdeutscher Mittelwerte. Für das Einzugsgebiet des Pegel Läwitz, dessen Messdaten zur Validierung der Modellierungsergebnisse herangezogen wurden, konnte ein mittlerer Gebietsabfluss (1975–2000) von 210 mm gemessen werden. In Kombination mit dem mittleren Niederschlag ergibt sich eine langjährige Verdunstungsrate von ca. 480 mm. Die Winter sind relativ lang und schneereich, so dass die Vegetationsperiode vergleichsweise spät einsetzt (Thres u. a. 1998).

3.1.4 Hydrologie

Die Trinkwassertalsperren Weida und Zeulenroda entwässern über die Weida in die Weiße Elster. Das Abflussverhalten der Weida ist durch geringe Verzögerungszeiten auf Niederschlagsereignisse gekennzeichnet. Die Ursachen hierfür sind in dem weitgehend undurchlässigen geologischen Untergrund (zumeist Tonschiefer) und dessen Verwitterungsprodukten zu suchen. In den Talbereichen

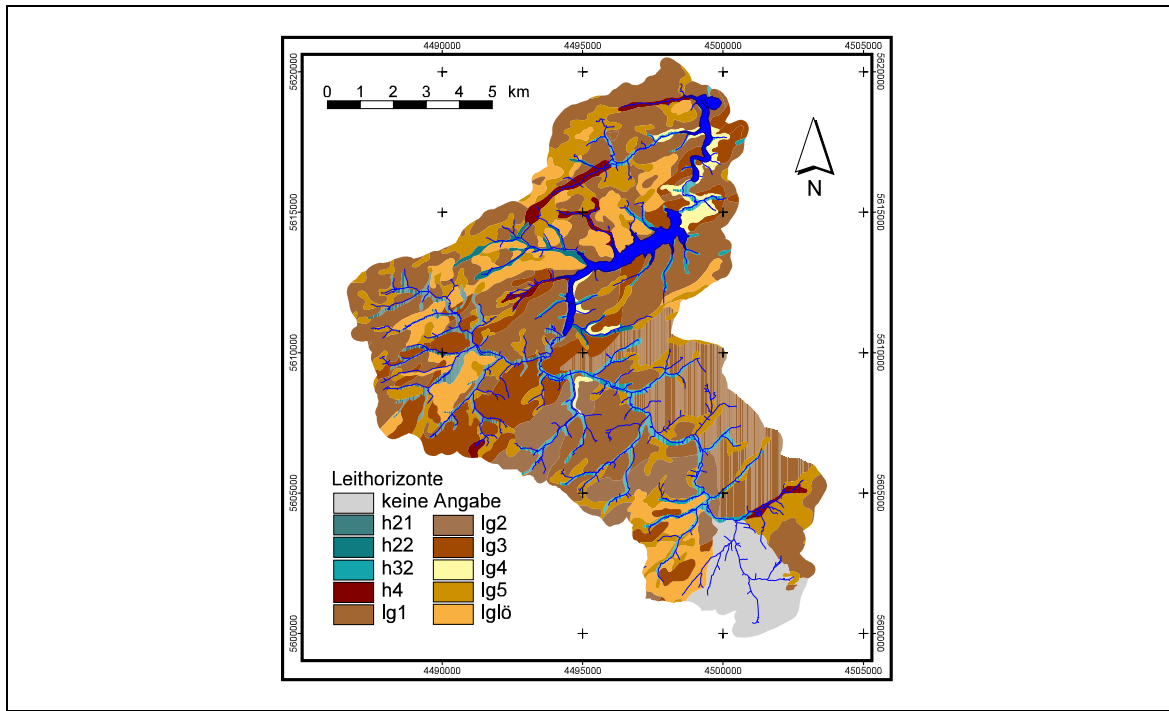


Abbildung 3.3: Böden im Untersuchungsgebiet, Erklärung der Legende in Tabelle 3.1

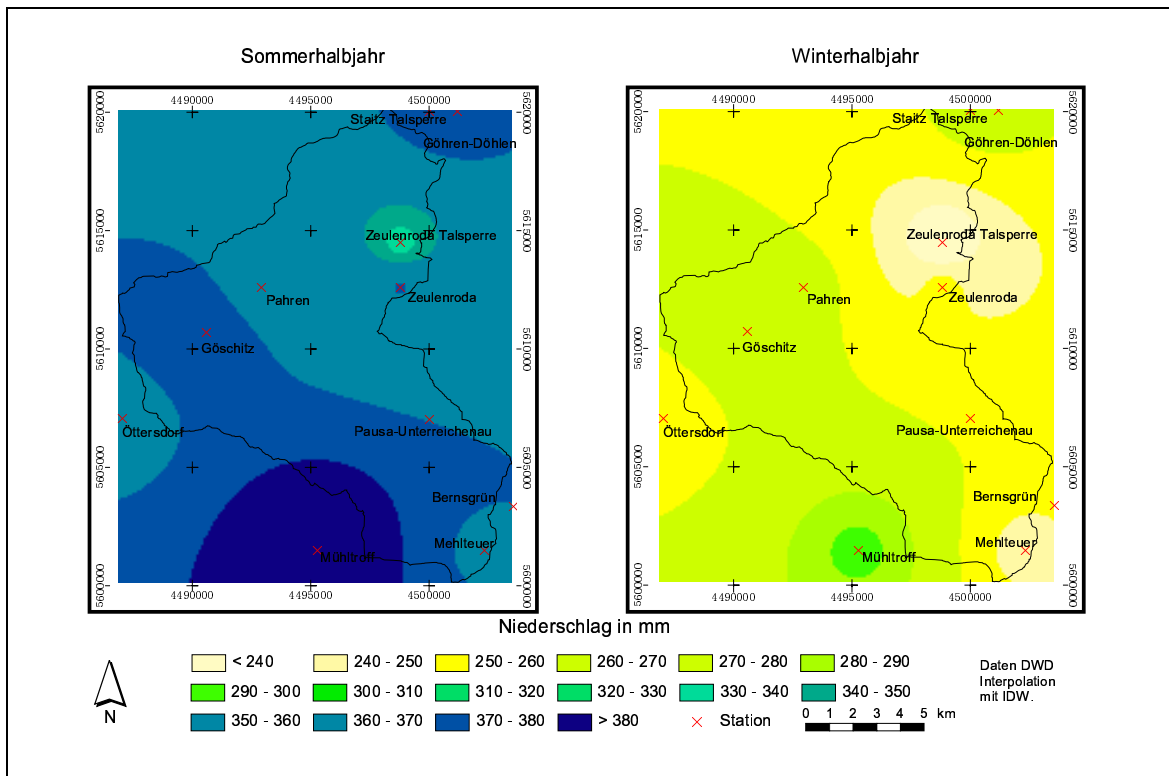


Abbildung 3.4: Durchschnittliche Winter- und Sommerniederschläge im Untersuchungsgebiet

Tabelle 3.2: Flächenanteile der landwirtschaftlichen Feldfrüchte (Daten Thüringer Talsperrenverwaltung)

Nutzung	Flächenanteil im Jahr 1998 [%]	Flächenanteil im Jahr 1999 [%]
Grünland	13,0	12,8
Feldgras / Klee gras	4,3	4,1
Winterweizen	10,5	11,2
Tritikale	1,4	1,3
Winterroggen	1,1	1,1
Wintergerste	8,4	5,9
Sommergerste	8,8	7,5
Mais	5,2	5,9
Raps	9,1	12,2

akkumuliert sich lockeres Sedimentgestein, dessen Grundwasser häufig in enger Interaktion mit dem Vorfluter steht.

Insgesamt ist das Abflussregime im Einzugsgebiet starken anthropogenen Einflüssen unterworfen. Dränirte Flächen nehmen 17 % der Gesamtfläche ein, wobei die Gerinne zumeist begradigt sind und sehr häufig kaskadenartig angelegte Teiche aufweisen. Der Gewässerausbau und die Dränagen sorgen in Kombination für verkürzte Verzögerungszeiten der Niederschlags-Abfluss-Beziehung. Lediglich die Teiche wirken dämpfend auf den Abflussverlauf.

3.1.5 Landnutzung

Das Untersuchungsgebiet wird durch landwirtschaftliche Nutzung (65,5 % der Fläche) und Nadelwälder (ca. 27,8 % der Fläche) dominiert. Zu ca. 5 % enthält das Gebiet Siedlungsflächen, die sich auf zwei Kleinstädte – Zeulenroda und Pausa – und auf eine Vielzahl kleinerer Siedlungen verteilen. Die Talsperren nehmen zusammen mit den angesprochenen Teichen einen Flächenanteil von ca. 2 % ein (Flügel und Müschen 2001).

Die landwirtschaftlichen Nutzflächen werden größtenteils zur Produktion von Viehfutter genutzt, da sie aufgrund der Bodenverhältnisse nicht für die Produktion von beispielsweise Kartoffeln oder Zuckerrüben geeignet sind. Zudem bewirkt das vergleichsweise kühle Klima eine Verkürzung der Vegetationsperiode und erschwert somit den Anbau anspruchsvoller Kulturen. Der Marktfruchtanbau beschränkt sich daher im Wesentlichen auf Raps zur Ölgewinnung und auf Braugerste. Die Flächenanteile der wesentlichen Feldfrüchte am Gesamtgebiet sind in Tabelle 3.2 dargestellt.

3.2 Die Simulationssoftware WASMOD

Das für die Darstellung der hydrologischen und chemischen Prozessdynamik ausgewählte Modell WASMOD (WATER and Substance Simulation MODEL) wurde von Reiche im Jahr 1991 entwickelt und seitdem ständig erweitert und vervollständigt (Reiche 1991, 1994, 1996, Reiche u. a. 1999). Es

handelt sich hierbei um ein modular aufgebautes System, das in der Lage ist, den Wasser- und Stoffhaushalt eines Einzugsgebietes in verschiedener räumlicher und zeitlicher Auflösung zu beschreiben. Das Modell umfasst dabei unter anderem die Abbildung des Wasser- und Energiehaushaltes, die Nährstoffaufnahme in Abhängigkeit von der Vegetationsentwicklung und chemische Transformationsprozesse im Boden. Zur räumlichen Diskretisierung des modellierten Einzugsgebietes wird dabei das Konzept der kleinsten gemeinsamen Geometrien angewandt, welches die Eingangsdaten sowohl inhaltlich als auch geometrisch weitgehend erhält. Somit können teilflächenspezifische Aussagen abgeleitet werden, die sich eng an den vorhandenen Gebietsinformationen orientieren. Von Vorteil ist es hier, dass WASMOD auf physikalisch basierten Algorithmen beruht und somit auf eine Kalibration weitgehend verzichtet werden kann (Beven 1989, Göbel 1997).

3.2.1 Modellbeschreibung

WASMOD unterscheidet die drei Ökosystemkompartimente Wasser, Boden und Vegetation. Diese werden durch physikalisch basierte Eingabedaten spezifiziert und in Form von Differenzialgleichungen abgebildet (Reiche 1996). Der Wasserhaushalt wird hierbei durch die Module Bodenwasserdynamik, Evapotranspiration, Interzeption und Oberflächenabfluss beschrieben. Die vertikale Bodenwasserbewegung als Teil der Bodendynamik lässt sich durch die Bewegungsgleichung des Bodenwassers mit Hilfe der RICHARDS-Gleichung darstellen. Die Veränderung des Wassergehaltes eines Bodenkompartmentes pro Zeiteinheit wird hierbei als Summe der Flüsse repräsentiert, die sich aus dem Gradienten innerhalb der Bodenmatrix und dem Gravitationspotenzial ergeben. Als Grundlage zur Berechnung des Grundwasser- und Dränabflusses dient das Gefälle zwischen dem betrachteten Punkt und dem Vorfluter. Die Abschätzung der Interzeption erfolgt nach dem empirisch ermittelten Ansatz von Hoynigen-Huene (1983). Die aktuelle Evapotranspiration lässt sich auf Basis der potenziellen Evapotranspiration berechnen (Braun 1975). Sie erfolgt, je nach Einzugsgebiet, durch das Verfahren nach Haude (1955) oder in küstennahen Regionen nach Wendling u. a. (1991). Daraufhin wird die Differenz aus potenzieller Evapotranspiration und Interzeption mit einem phänologischen Korrekturfaktor multipliziert (Ernstberger 1987). Oberflächenabfluss wird simuliert, wenn nicht in den Bodenkörper infiltrierte Niederschläge eine von der jeweiligen Vegetation abhängige Höhe überschreiten sowie ein entsprechendes Gefälle ($>2\%$) existiert. Diesem Prinzip folgt auch die Berechnung des Interflows, wenn in einer oberhalb des Grundwasserspiegels gelegenen Bodenschicht Wassersättigung auftritt. Die Böden werden in 15 Kompartimente unterschiedlicher Mächtigkeit unterteilt, wobei der Grundwasserspiegel die untere Grenze repräsentiert. Sie werden über Größen wie Dichte, Leitfähigkeit, pH-Wert oder auch den Kohlenstoff- und Stickstoffgehalt beschrieben. Aus diesen Größen lassen sich z. B. Mineralisierungsvorgänge im Boden, die Denitrifikation oder auch die Auswaschung von Stickstoff kalkulieren.

Die Vegetation wiederum lässt sich mit Hilfe dynamischer Variablen wie dem Blattflächenindex und der Durchwurzelungstiefe modellieren. Hierbei wird angenommen, dass jeder Vegetationstyp seine maximale Nährstoffaufnahmekapazität ausschöpft. Als Ergebnis der Simulation werden das Pflanzenwachstum, der Ernteertrag oder auch die Dekompostierung ausgewiesen.

Die Stofftransportprozesse in den betrachteten Ökosystemkompartimenten werden in enger Kopp-

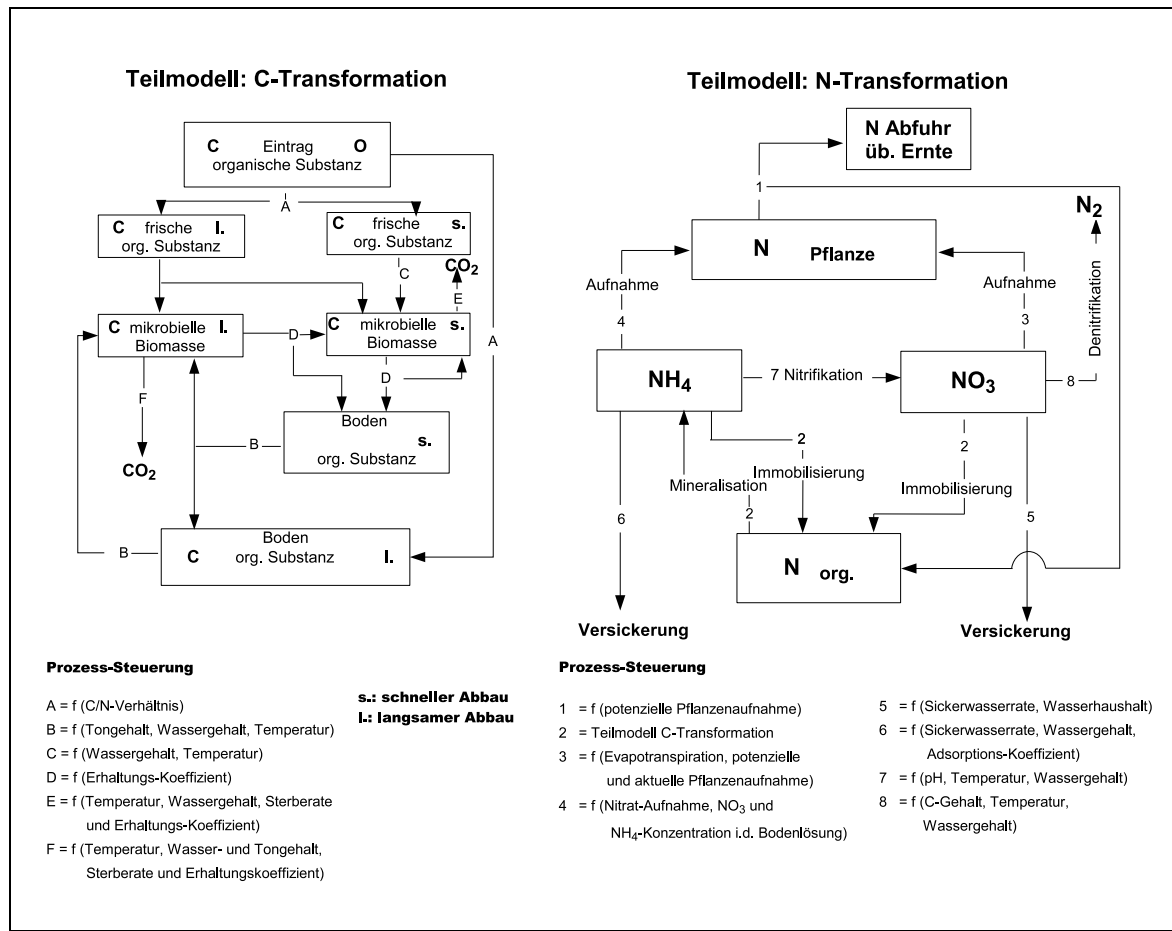


Abbildung 3.5: Modellierte Teilprozesse zum Kohlenstoff- und Stickstoffhaushalt (Reiche 1996)

lung an die Kohlenstoff- und Stickstoffdynamik simuliert. Abbildung 3.5 zeigt einen Überblick der in WASMOD berücksichtigten Prozesse zur Beschreibung der Kohlenstoff und Stickstoffdynamik.

Die mikrobiologischen Prozesse im Rahmen des Stickstoffhaushaltes sind eng mit der Kohlenstoffdynamik verbunden und werden daher in WASMOD an das Modul zur Ermittlung des Umsatzes der organischen Substanz gekoppelt (Hansen u. a. 1990). Dabei wird die organische Substanz in drei Kategorien untergliedert:

1. im Boden lagernde organische Substanz,
2. mikrobielle Biomasse und
3. zugefügte frische Substanz.

Im Stickstoffhaushalt werden darauf aufbauend die Prozesse Nitrifikation und Denitrifikation, Mineralisation, Nitrat- und Ammoniumaufnahme durch die Pflanzen sowie Ammoniakverdunstung beschrieben. Bilanziert werden sowohl Stickstoffeinträge durch Düngung als auch solche infolge atmosphärischer Deposition.

Tabelle 3.3: Liste der berücksichtigten Einzelprozesse (Reiche 1991)

als Standortmodell	
1	Simulation der Bodenwasserdynamik (inkl. Interzeption, Evapotranspiration, Infiltration)
2	Simulation des Drän-Abflusses
3	Simplifizierte Simulation des Grundwasserabflusses und des Grundwasserflurabstandes
4	Simulation des vertikalen Transportes gelöster Stoffe in Böden (inkl. Aufnahme durch Pflanzenwurzeln)
5	Simulation der Ad- und Desorptionsdynamik von Stoffen in Böden
6	Berechnung des vertikalen Bodenwärmetransports
7	Simulation der Kohlenstoffumsetzungsprozesse im Boden (Humifizierung, Mineralisation inkl. Quantifizierung der CO_2 -Freisetzung)
8	Berechnung der mikrobiell gesteuerten Stickstoffumsetzungsprozesse im Boden und an der Bodenoberfläche (N-Ammonifizierung, N-Nitrifizierung, N-Denitrifikation, N-Immobilisierung)
9	Berechnung der gasförmigen NH_4 -N-Verluste
10	Berechnung des lateralen Transports gelöster Stoffe durch die gesättigte Zone
11	Berechnung des Transports gelöster Stoffe mit dem Dränwasser
12	Abschätzung langfristiger Veränderungen der Wasserleitfähigkeit und des Wasserhaltevermögens in Abhängigkeit von der Humusdynamik
13	Quantifizierung der N- und C-Akkumulation unterschiedlicher Pflanzenkompartimente
als Gebietsmodell	
1	Simulation des Oberflächenabflusses vom Hang bis in den Vorfluter bzw. in abflußlose Senken
2	Berechnung von flächenbezogenen Wasser- und Stickstoffbilanzen mit hierarchisiertem Flächenbezug von der 'kleinsten Geometrie' (definiert durch einheitliche Vegetation, Relief- und Bodenparameterisierung) über Einzelschläge, Teileinzugsgebiete bis zum Gesamteinzugsgebiet.
3	Berechnung von Abflußmengen und Stickstofffrachten als Eintrag in Gewässer und Gewässerteilabschnitte in unterschiedlicher zeitlicher Auflösung.

Transport- und Transformationsprozesse finden in allen betrachteten Ökosystemkompartimenten und zwischen diesen statt. Dabei werden vertikale und horizontale Vorgänge nacheinander simuliert (Reiche 1996). Lateraler Transport findet an der Bodenoberfläche, im Grundwasserleiter sowie in oberflächennahen Schichten statt (Interflow) und endet im Vorfluter. Der Transport von Stoffen in der Bodenlösung wird in Form von Konvektion, molekularer Diffusion und hydrodynamischer Dispersion berücksichtigt.

Die Ergebnisse der Modellierung werden von WASMOD für jede Teilfläche als Jahreswert ausgegeben. Während des Modellierungsprozesses wird jedoch prozessbezogen in unterschiedlichen Zeitschritten simuliert. Dies ermöglicht einerseits eine sehr exakte Berechnung physikalisch basierter Prozesse und andererseits eine Minimierung des Rechenaufwandes für konzeptionelle Kalkulationen.

Eine zusammenfassende Übersicht über die von WASMOD abgebildeten Mechanismen für die Verwendung als Standortmodell einerseits und als Gebietsmodell auf der Grundlage der Standortmodellierung andererseits ist in Tabelle 3.3 dargestellt.

3.2.2 Modellierungsergebnisse

Für die Stofftransportmodellierung mit WASMOD standen folgende Zeitreihen zur Verfügung:

1. Klimadaten mit täglichen Werten von minimaler/maximaler Temperatur, Niederschlagsmenge, Globalstrahlung sowie Luftfeuchtigkeit,
2. Nutzungsdaten für die landwirtschaftlich genutzten Einheiten in einer jährlichen Auflösung mit Informationen über angebaute Fruchtarten und eingesetzte Düngermengen.

Zur Validierung der Modellergebnisse standen Messdaten eines Gewässermesspegels am Auslass des Teileinzugsgebietes Läwitz mit einer Gesamtfläche von ca. 100 km² zur Verfügung. Diese beinhalteten Durchflussmengen für den gesamten Modellierungszeitraum sowie den Gehalt an mineralischem Stickstoff ab November 1997. Beide Datenreihen lagen in täglicher Auflösung vor. Aufgrund der Möglichkeit zur Validierung und wegen des geringeren Datenaufkommens wurden zunächst alle Simulationen mit WASMOD wie auch die Anwendungen des HydroNet nur für das genannte Teileinzugsgebiet durchgeführt. Eine abschließende Bearbeitung des Gesamtgebietes ist in Abschnitt 3.6.4 beschrieben.

Die Modellierung erfolgte insgesamt für die Jahre 1971 bis 2000 für 14789 räumliche Einheiten (Fink 2004). Abbildung 3.6 zeigt beispielhaft die Ergebnisse der Simulation des Ist-Szenarios für das Jahr 2000. Beim Vergleich der N-Austräge über den Grundwasser- und Interflowpfad ist deutlich zu erkennen, dass der Interflowanteil überwiegt.

3.3 Definition von Landnutzungsszenarien

Um die für die Parametrisierung des HydroNet erforderlichen Aktivierungsfunktionen ableiten zu können, mussten zunächst Szenarien entwickelt werden, welche die interessierende Bandbreite von N-Einträgen auf den einzelnen räumlichen Modelleinheiten möglichst vollständig abdecken. Weil das HydroNet zwar eine Modifikation der N-Einträge zulässt, eine direkte Änderung der angebauten Fruchtart aber nicht möglich ist, mussten Einflüsse auf den Stickstoffhaushalt der räumlichen Einheiten, die nicht durch physiogeografische Eigenschaften bedingt werden (z. B. ökonomisch motivierte Nutzungspräferenzen des Menschen), weitestgehend ausgeschlossen werden. Zu diesem Zweck wurde eine aggregierte, generalisierte Landnutzung als Grundlage für anschließende Eingriffe in die Düngerezufuhr auf einzelnen räumlichen Einheiten definiert. Für die Charakterisierung einer solchen generalisierten Landnutzung mussten nicht nur einzelne, repräsentative Fruchtarten berücksichtigt werden, sondern darüber hinaus die üblichen Zyklen des Anbaus verschiedener Arten (Fruchtfolgen).

Als Voraussetzung für die Ermittlung der gesuchten Aktivierungsfunktionen musste daher festgelegt werden,

1. welche Fruchtarten und Fruchtfolgen für die Bewirtschaftung des betrachteten Gebietes repräsentativ sind und zu einer generalisierten Landnutzung zusammengefasst werden und

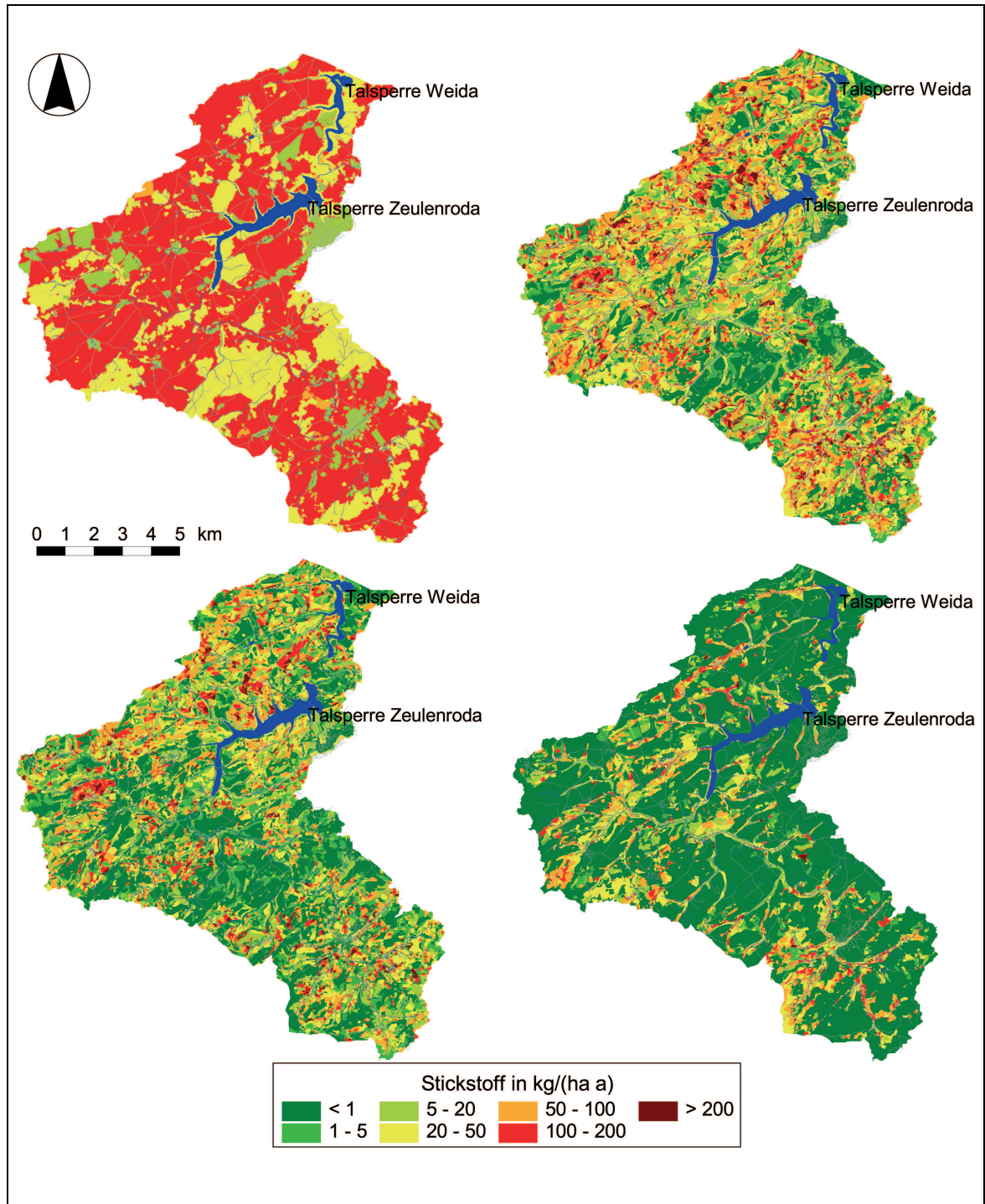


Abbildung 3.6: Flächenhafte Darstellung von N-Eingabe und N-Entzug der Simulation des Ist-Szenarios für das Jahr 2000 mit Stickstoffeintrag über Düngung und atmosphärische Deposition (oben links), Stickstoffgesamtaustrag über das Wasser (oben rechts), Stickstoffaustrag über Interflow (unten links) sowie Stickstoffaustrag über Drän und Grundwasser (unten rechts) (Fink 2004)

2. welche Änderungen gegenüber der Standarddüngung für diese Fruchtfolgen betrachtet werden sollten.

3.3.1 Betrachtungszeitraum

Für die Bestimmung der Landnutzung und der damit verbundenen Fruchtfolgen musste in einem ersten Schritt festgelegt werden, über welche Zeiträume die veränderten N-Einträge simuliert werden sollten. Dieser Wert sollte sich am Planungszeitraum orientieren, innerhalb dessen in der Realität Auswirkungen aus Bewirtschaftungsänderungen erwartet werden. Nur wenn diese Zeitspanne ausreichen groß gewählt wird, besteht die Möglichkeit, dass das modellierte System auf die veränderten äußeren Bedingungen im gewünschten Umfang reagieren kann. Dem gegenüber stand die Bestrebung, Änderungen zu prognostizieren, die innerhalb eines möglichst kurzen Zeitraumes zu den gewünschten Auswirkungen auf die N-Einträge in die Talsperre führen.

Zu diesem Zweck wurden von Fink (2004) die Auswirkungen einer Einschränkung der Düngung auf allen landwirtschaftlich genutzten Flächen im Einzugsgebiet der Dauer der Einschränkung gegenübergestellt. Dazu erfolgten ausgehend vom N-Solleintrag Reduktionen um 10 %, 20 % und 30 %, verglichen wurde jeweils der N-Gesamtaustrag aus dem Gebiet in den Vorfluter (Abbildung 3.7). Im ersten und zweiten Jahr des betrachteten Zeitraumes von 1996 bis 2000 wirken sich die Änderungen demnach nur geringfügig aus, im dritten Jahr werden die Effekte der Reduktion zusätzlich durch Klimaschwankungen überlagert. Erst ab dem vierten Jahr zeichnen sich deutliche Unterschiede in den Auswirkungen ab.

Im vorliegenden Anwendungsfall wurde aufgrund der dargestellten Überlegungen und Erkenntnisse ein Betrachtungszeitraum von fünf Jahren festgelegt. Hierbei wurde der Zeitraum von 1996 bis 2000 ausgewählt. Diese Auswahl erfolgte zum einen aufgrund einer besonders umfangreichen und verlässlichen Datenlage für diesen Zeitraum. Darüber hinaus hatten statistische Analysen des in Frage kommenden Gesamtzeitraums ergeben, dass die Klimaparameter in den ausgewählten Jahren die entsprechenden Durchschnittswerte besonders gut repräsentieren (Fink 2004).

3.3.2 Landnutzung

Zur Ermittlung einer generalisierten Landnutzung wurde zunächst eine fünfjährige Fruchtfolge ermittelt, welche die wichtigsten der im Gebiet angebauten Fruchtarten umfasst (Fink 2004). Diese sind in Tabelle 3.4 dargestellt. Um darüber hinaus innerhalb der einzelnen Jahre eine repräsentative Verteilung der Landnutzungen über das Gesamtgebiet sicherzustellen, wurde den Modelleinheiten für das erste Jahr zufällig je eine der genannten Fruchtarten als Initialnutzung zugewiesen und in den Folgejahren entsprechend der Fruchtfolge variiert. Abbildung 3.8 zeigt die Vorgehensweise exemplarisch für drei Modelleinheiten, denen initial die Fruchtarten Winterweizen (KGG1), Wintergerste (KGG2) sowie Mais (KGG3) zugewiesen wurden.

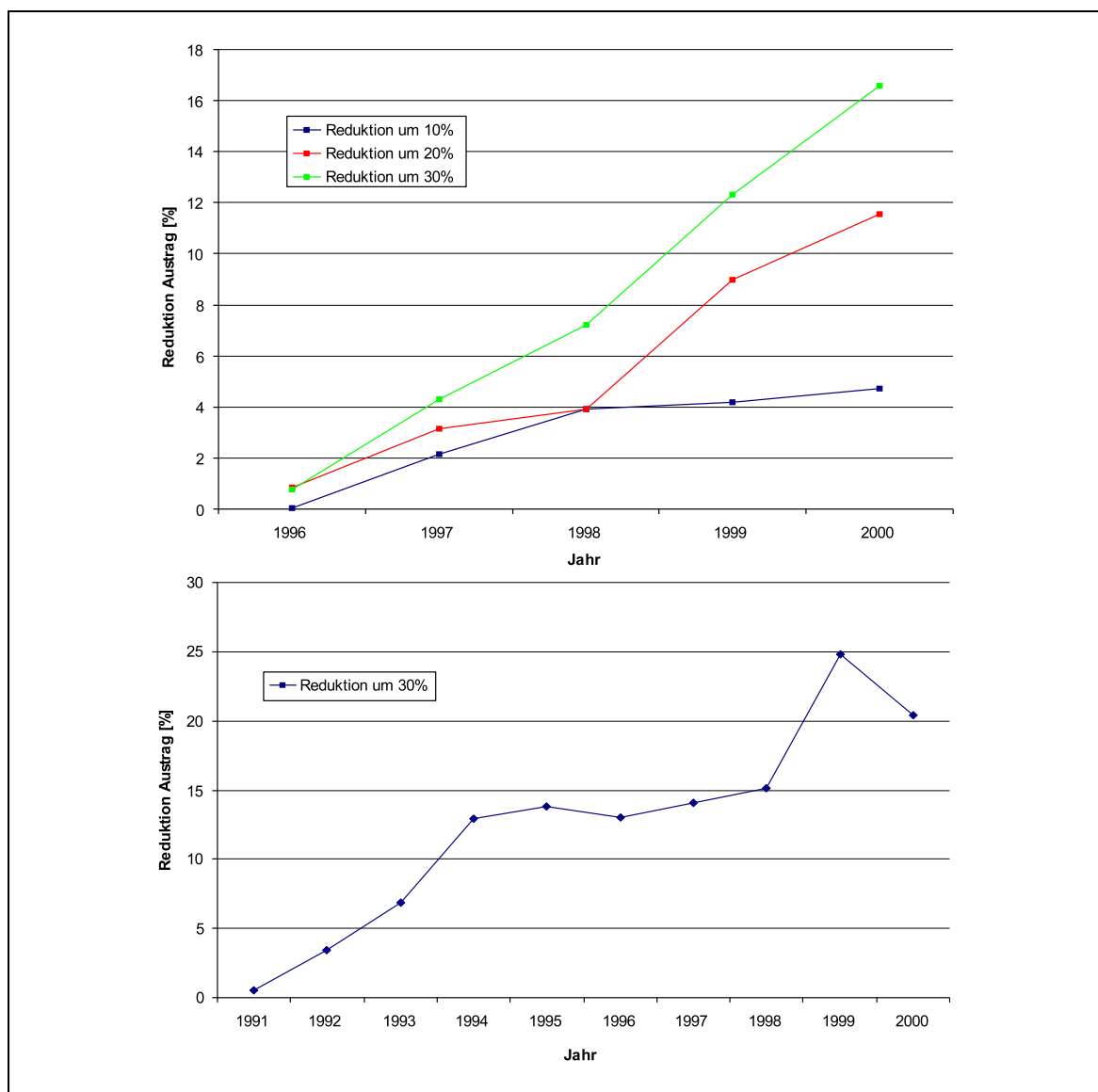


Abbildung 3.7: Gegenüberstellung der Auswirkungen von N-Reduktionen über Zeiträume von 5 Jahren (oben) und 10 Jahren (unten) (Fink 2004)

Tabelle 3.4: Fruchtfolge für das ausgewählte Landnutzungsszenario

Jahr in Fruchtfolge	Fruchtart
1	Winterweizen
2	Wintergerste
3	Mais
4	Sommergerste
5	Winterraps

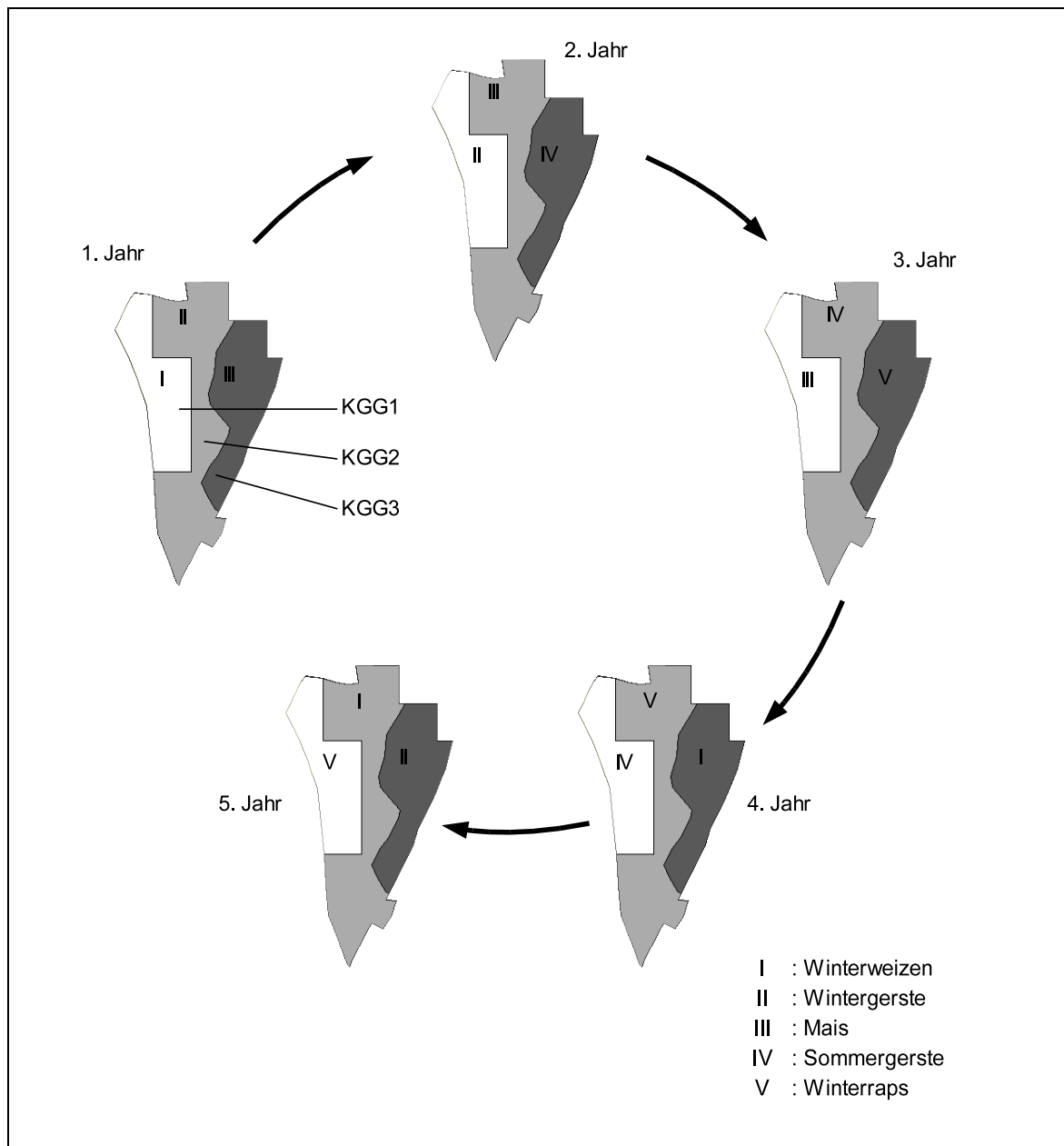


Abbildung 3.8: Beispielhafte Variation der Fruchtarten auf drei Modelleinheiten während einer fünf-jährigen Modellierung

3.3.3 Düngung

Um Änderungen gegenüber der Standarddüngung in den Landnutzungsszenarien zu repräsentieren, wurden verschiedene Düngeszenarien entwickelt. Im Modell WASMOD wird die N-Düngung berücksichtigt, indem zu festgelegten Zeitpunkten während des Jahresverlaufs N-Einträge mit variabler Intensität simuliert werden können. Jeder Fruchtart ist zu diesem Zweck eine Folge solcher N-Einträge zugeordnet, die durch ihre zeitliche Verteilung über das modellierte phenologische Jahr und die Intensitäten der einzelnen Einträge gekennzeichnet sind. Um die Einträge für die vorliegende Aufgabenstellung zu variieren, wurden die bereits vorhandenen, fruchtartspezifischen N-Einträge mit einem vom jeweiligen Szenario abhängigen Faktor multipliziert, so dass die Szenarien zwar unterschiedliche Eintragsintensitäten aufwiesen, sich aber in der zeitlichen Verteilung der einzelnen Einträge über die phenologische Periode von der Ausgangskonfiguration nicht unterschieden.

Die Düngeszenarien, die auf die in Tabelle 3.4 genannten Fruchtarten anzuwenden waren, wurden so gewählt, dass sie die gesamte Bandbreite zwischen der Standarddüngung und der vollständigen Einstellung der Düngung umfassen. Darüber hinaus mussten auch Szenarien mit N-Einträgen oberhalb derer der Standarddüngung definiert werden, um einen definierten und korrekten Verlauf der N-Austragsfunktion auch nahe der zur Standarddüngung gehörenden N-Einträge sicherzustellen. Als Ergebnis dieser Überlegungen wurden 13 Szenarien $T_0, T_{10}, \dots, T_{120}$ definiert, welche die Düngung von 0 % bis 120 % der standardmäßigen Einträge in Abständen von jeweils 10 % repräsentieren. Dabei bezeichnet T_i dasjenige Szenario, welches einen Eintrag von i % des Standardeintrags beinhaltet.

Um für die Düngeszenarien sämtliche der aufgeführten Fruchtarten zu berücksichtigen, wurden alle Szenarien über einen Zeitraum von fünf Jahren modelliert. Pro Jahr und Modelleinheit wurde jeweils eine der Fruchtarten aus Tabelle 3.4 simuliert und die N-Einträge dabei entsprechend des aktuellen Szenarios modifiziert. Alle übrigen Parameter, insbesondere Initialnutzung aller Einheiten sowie die Rotation der Fruchtarten über den Modellierungszeitraum, blieben dabei konstant.

Das Ergebnis der Modellierung mit WASMOD bestand aus einer N-Austragsmenge pro Szenario, Jahr und Modelleinheit. Um das Input-/Output-Verhältnis einer Einheit zu bestimmen, wurde dieser Wert der Summe aller zugehörigen N-Eintragsmengen dieses Jahres gegenübergestellt. Durch die Berücksichtigung der Daten einer Einheit entlang der gesamten Fruchtfolge ließ sich ein durchschnittliches Verhältnis ermitteln, welches die Bandbreite üblicher Landnutzungen für ein Düngeszenario umfasste. Durch die Berücksichtigung der Ergebnisse der Düngeszenarien konnten für alle räumlichen Einheiten die Stützstellen ihrer Beziehung zwischen N-Eintrag und N-Austrag für eine generalisierte Landnutzung bestimmt werden.

3.4 Vom Stofftransportmodell zum HydroNet

Um das im Kapitel 2 beschriebene Verfahren in Verbindung mit der Software WASMOD anwenden zu können, mussten folgende Vorverarbeitungsschritte ausgeführt werden:

1. Ableitung der räumlichen Modelleinheiten

2. Ableitung der topologischen Beziehungen zwischen den Modelleinheiten
3. Definition von Szenarien des Stickstoffeintrags
4. Modellierung der Szenarien mit WASMOD
5. Ermittlung der N-Austragsfunktionen aus den Modellergebnissen für alle Modelleinheiten

Eine detaillierte Beschreibung der einzelnen Schritte erfolgt in den folgenden Abschnitten.

3.4.1 Räumliche Modelleinheiten und Neuronen

Um die von WASMOD berücksichtigten räumlichen Einheiten auszuweisen, wurde ein Verfahren von Reiche zur Ableitung so genannter kleinster gemeinsamer Geometrien (KGG) eingesetzt (Fink 2004). Grundidee dieses Ansatzes ist die Überlagerung und Verschneidung verschiedener, für die betrachteten Prozesse relevanter räumlicher Merkmalsebenen. Im vorliegenden Fall wurden dazu folgende Informationen berücksichtigt:

1. Bodenparameter
Hierzu zählen im Einzelnen die Bodenart, der Skelettanteil, der Anteil organischer Substanz sowie bodenphysikalische Eigenschaften (Leitfähigkeit im gesättigten Zustand, Porengrößenverteilung, Lagerungsdichte).
2. Landnutzung
Die Informationen über Landnutzung beziehen sich in landwirtschaftlich genutzten Gebieten auf Ackerflächen (Schläge) sowie in den übrigen Gebieten auf Teilflächen, auf denen eine homogene Landbedeckung anzutreffen ist (z. B. Wälder).
3. Relief
Zur Ableitung von Reliefparametern wurde das Gebiet mit Hilfe eines digitalen Geländemodells in Teilflächen (Reliefeinheiten) zerlegt, die bezüglich ihrer Hangneigung eine ähnliche Signatur aufweisen.
4. Gewässernetz
Das Gewässernetz beinhaltet sämtliche Oberflächengewässer im Einzugsgebiet.
5. Teileinzugsgebiete
Diese Information dient der Zuordnung der Teilflächen zu einem lokalen Vorfluter. Die Teileinzugsgebiete wurden aus einem digitalen Geländemodell und einem Gewässernetz abgeleitet.
6. Dränflächen
Diese meist landwirtschaftlich genutzten Flächen wurden zum Zwecke der Entwässerung mit Dränagen versehen. Da diese einen wesentlichen Einfluss auf den Bodenwasserhaushalt ausüben, mussten sie bei der KGG-Ausweisung berücksichtigt werden.
7. Geologische Parameter
Zur Identifizierung grundwasserführender Schichten wurde das Gebiet in Bereiche mit durchlässigen und undurchlässigen geologischen Schichten unterteilt. Diese Informationen gehen

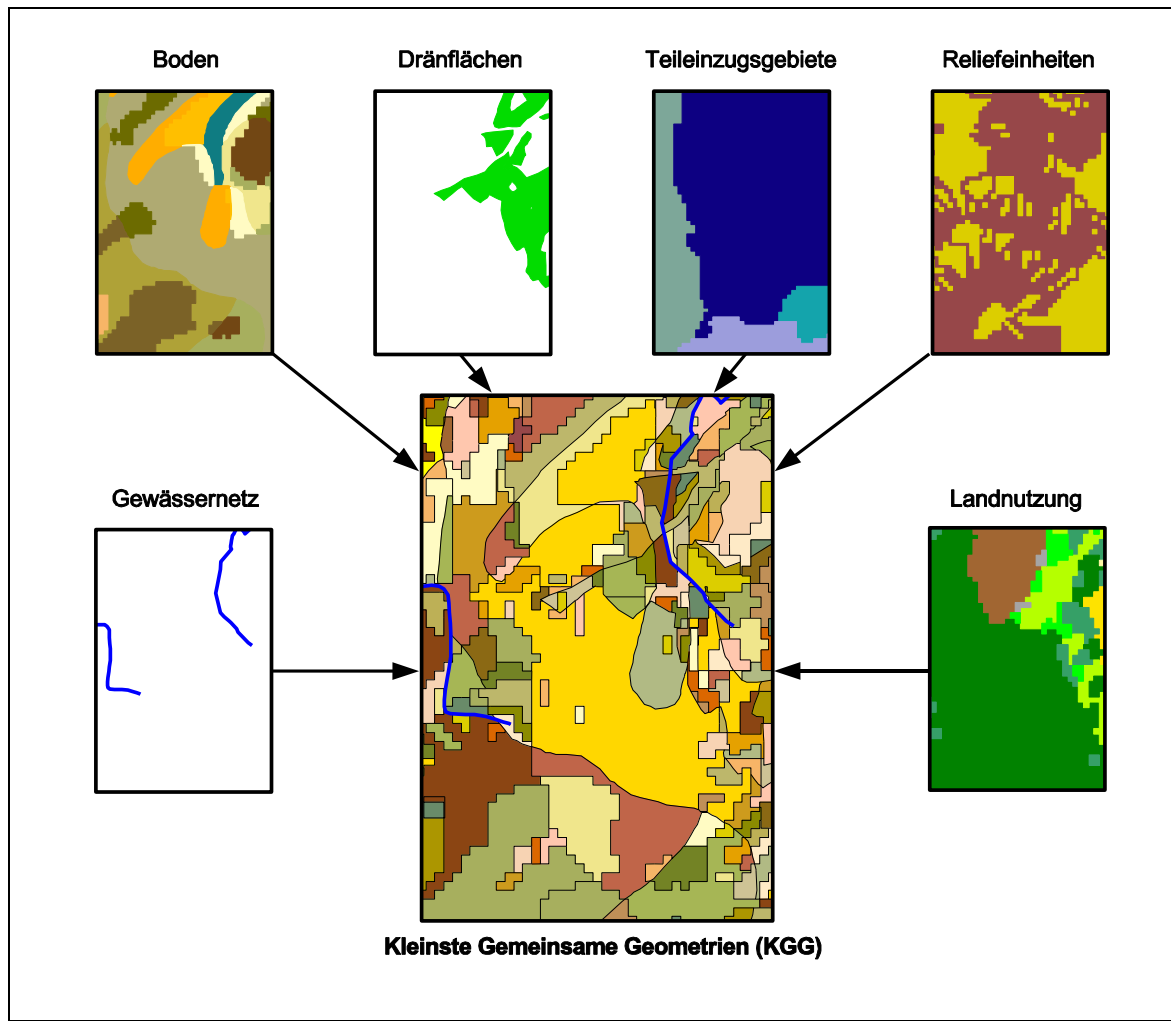


Abbildung 3.9: Überlagerung verschiedener Informationsebenen zur KGG-Ableitung (Fink 2004)

nicht direkt in die KGG-Ableitung ein, sondern werden den einzelnen KGG erst nach ihrer Ermittlung zugewiesen.

Die räumliche Grundlage jeder dieser Merkmalsebenen ist eine Menge von Polygonen, die Teilflächen mit homogenen Ausprägungen des entsprechenden Merkmals repräsentieren. Zunächst werden diese Ebenen mittels Overlay-Analyse miteinander verschnitten. Dabei wird durch eine logische *oder*-Verknüpfung die Vereinigung der durch die Polygone repräsentierten Merkmale gebildet. Das Ergebnis besteht aus neuen Polygonen (KGG), die die Grundlage für die Modellierung mit WASMOD bilden (Dibbern u. a. 1996). Die Merkmalsausprägungen der Ausgangsdaten werden dabei für jede einzelne KGG vermerkt. Abbildung 3.9 zeigt die Vorgehensweise bei der Overlay-Analyse exemplarisch. Bei der Verschneidung entstandene Polygone, die eine festgelegte Größe von 1000 m² unterschritten, wurden eliminiert, indem sie mit dem Nachbarpolygon vereinigt wurden, mit dem sie die längste gemeinsame Grenze teilen.

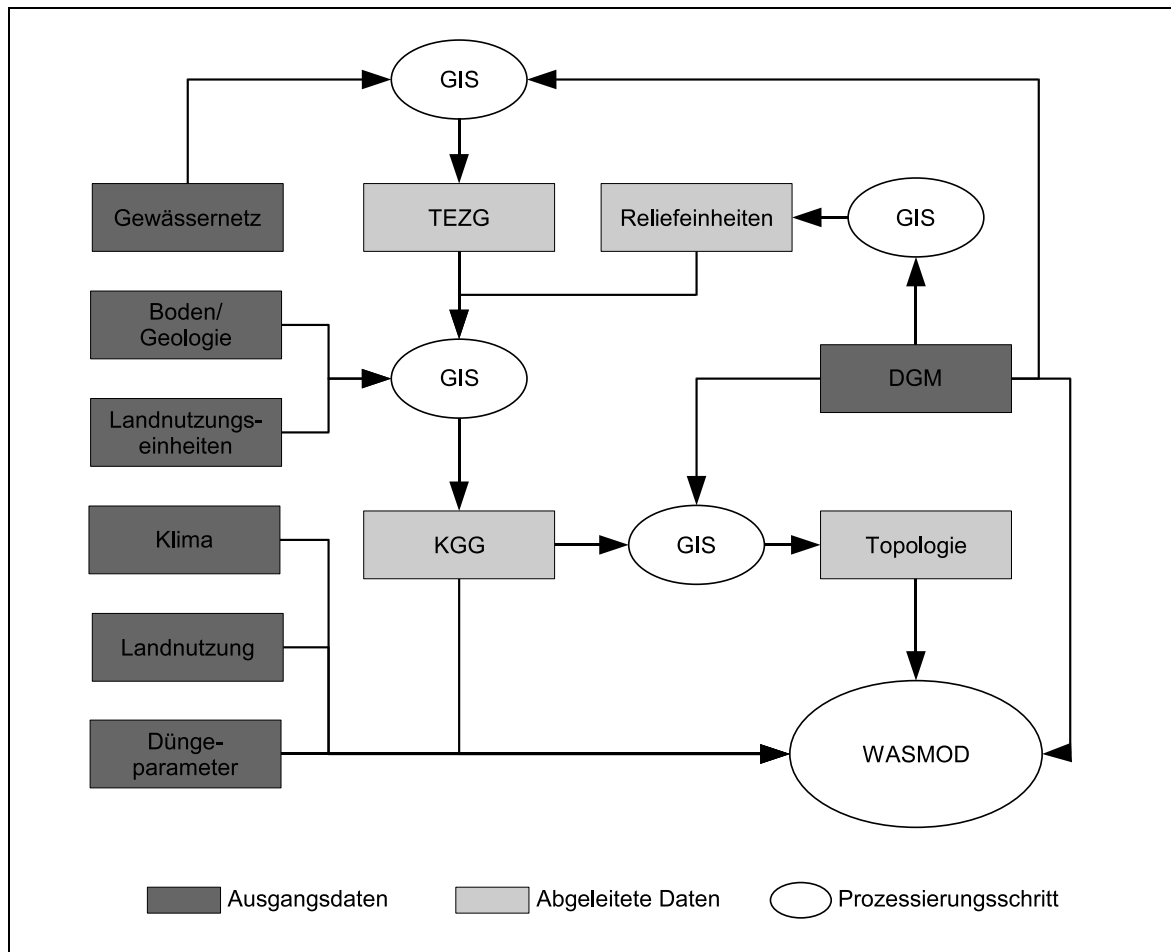


Abbildung 3.10: Datenvorverarbeitung für die Modellierung mit WASMOD

Der Datenfluss bei der KGG-Ableitung ist in Abbildung 3.10 nochmals dargestellt. Auf der Grundlage der abgeleiteten Geometrien konnten schließlich entsprechend den Ausführungen in Abschnitt 2.6.1 die Neuronen des HydroNet erzeugt werden.

3.4.2 Gebietstopologie und Netzwerkstruktur

Um topologische Beziehungen zwischen den räumlichen Modelleinheiten zu identifizieren, wurde auf der Basis von Informationen über Lage und Höhe der abgeleiteten Geometrien bestimmt, ob ein innerhalb einer Einheit $s \in S$ entstehender oberflächennaher oder oberflächlicher Abfluss in einen angrenzenden Vorfluter oder in eine benachbarte Einheit $t \in S$ abgegeben wird. Tritt der zweite Fall ein, so wird eine entsprechende topologische Beziehung mit Hilfe der Abbildung ds angelegt:

$$ds(s) := t,$$

sonst gilt:

$$ds(s) := \emptyset.$$

Kam mehr als ein Nachbarobjekt in Frage, so wurde dabei dasjenige ausgewählt, welches über die Grenze mit der geringsten durchschnittlichen Höhe mit der Ausgangseinheit verbunden war.

Die resultierende Gebietstopologie wurde verwendet, um die Interflowkanten und Grundwasserkanten im HydroNet zu erzeugen (vgl. Abschnitt 2.6.1). Darüber hinaus wurde das Eingabeneuron mit je einer Kante mit allen inneren Neuronen verbunden.

3.4.3 Aktivierungsfunktionen

Für die Darstellung der Aktivierungsfunktionen wurden entsprechend den Ausführungen in Abschnitt 2.8.2 sowohl Polylines als auch Polynome betrachtet. Da beide Typen grundsätzlich für die Darstellung von Aktivierungsfunktionen im HydroNet geeignet sind, wurden Tests durchgeführt, um ihre Vor- und Nachteile gegenüberstellen zu können. Im Mittelpunkt dieser Untersuchungen stand dabei die Frage, wie gut beide Formen in der Lage sind, die N-Austragsfunktionen zwischen den gegebenen Stützstellen anzunähern.

Für alle räumlichen Einheiten $s \in S$ wurden dazu Aktivierungsfunktionen auf der Grundlage der verfügbaren Stützstellen $P_s = \{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\}$ (vgl. S. 63) der N-Austragsfunktion erzeugt, die sich aus den Düngeszenarien ergaben. Von den m verfügbaren Stützstellen wurden jedoch nur $m - 1$ zur Ermittlung der Funktion verwendet, die übrige zu ihrer Validierung. Durch Wiederholung dieser Vorgehensweise für jede der Stützstellen ergaben sich somit m Aktivierungsfunktionen f_1, \dots, f_m pro räumlicher Einheit. Für den vorliegenden Anwendungsfall galt wegen der Verwendung der Düngeszenarien $\overline{T}_0, \dots, \overline{T}_{120}$ daher $m = 13$. Hierbei bezeichne f_i diejenige Aktivierungsfunktion, bei deren Ermittlung die Stützstelle (x_i, y_i) ausgelassen wurde. Als Maß für die Güte der Repräsentation dieser Stützstelle durch f_i wurde die relative Abweichung e_s des prognostizierten vom tatsächlichen Austrag herangezogen:

$$e_s(x_i, y_i) = \frac{|f_i(x_i) - y_i|}{y_i}. \quad (3.4.1)$$

Durch eine Durchschnittsbildung über alle Stützstellen lässt sich so für jede räumliche Einheit s ein Abbildungsfehler \overline{e}_s ermitteln:

$$\overline{e}_s = \sum_{i=1}^m \frac{e_s(x_i, y_i)}{m}. \quad (3.4.2)$$

Für die Gegenüberstellung der Funktionstypen wurden die Mittelwerte der Abbildungsfehler aller räumlichen Einheiten berechnet. Dabei ergaben sich für die Eingabedaten aus dem vorliegenden An-

wendungsfall folgende Fehler für Polyline ($e^{Polyline}$) und Polynome ($e^{Polynom}$):

$$e^{Polyline} = 0,107 \quad \text{und} \quad (3.4.3)$$

$$e^{Polynom} = 0,139. \quad (3.4.4)$$

Um die Auswirkungen einer geringeren Anzahl von Stützstellen auf dieses Ergebnis abschätzen zu können, wurden in einem zweiten Test nur die Stützstellen verwendet, die sich aus den Szenarien $\overline{T_0}, \overline{T_{20}}, \overline{T_{50}}, \overline{T_{70}}, \overline{T_{100}}, \overline{T_{120}}$ ergaben. Eine erneute Berechnung der durchschnittlichen Abbildungsfehler ergab dabei folgende Werte:

$$e^{Polyline} = 0,131 \quad \text{und} \quad (3.4.5)$$

$$e^{Polynom} = 0,168. \quad (3.4.6)$$

Die dargestellten Werte lassen die Schlussfolgerung zu, dass Polyline aufgrund des geringeren relativen Fehlers bei der Abbildung der tatsächlichen N-Austragsfunktion besser als Polynome zur Darstellung der Aktivierungsfunktion geeignet sind.

3.4.4 Kantengewichte

Die Auswertung der Ergebnisse aus der Szenarienmodellierung zeigte, dass WASMOD wie erwartet in der Lage war, die Modifikation der N-Einträge für die räumlichen Einheiten entsprechend der Dünge-szenarien abzubilden. Abbildung 3.11 zeigt die Beziehung zwischen den über alle Einheiten des Einzugsgebietes gemittelten Jahressummen der Ein- und Austräge für die Szenarien $\overline{T_0}, \dots, \overline{T_{120}}$. Bei der Betrachtung einzelner räumlicher Einheiten ergab sich ein differenzierteres Bild.

Im Hinblick auf die Ermittlung der Kantengewichte im HydroNet war darüber hinaus von Interesse, ob sich das Verhältnis zwischen Interflow und Grundwasserabfluss einer Fläche in Abhängigkeit vom gegebenen Szenario verändern würde. Entsprechend Definition 2.2.2 wurde davon ausgegangen, dass dieses Verhältnis für jede räumliche Einheit konstant ist. Um diese Annahme zu überprüfen, wurden für alle Einheiten die Interflow- und Grundwasseranteile aller Szenarien ermittelt und gegenübergestellt. Der Mittelwert der Interflowanteile (μ_{int}) und Grundwasseranteile (μ_{grd}) über alle Szenarien betrug dabei

$$\mu_{int} = 0,644 \quad \text{und} \quad (3.4.7)$$

$$\mu_{grd} = 0,356. \quad (3.4.8)$$

Abbildung 3.12 zeigt die Verteilung dieser Anteile für die einzelnen Szenarien. Dabei lässt sich leicht erkennen, dass im Mittel über alle Einheiten von konstanten, vom jeweiligen N-Eintrag unabhängigen Anteilen ausgegangen werden kann.

Um diese Vermutung auch für einzelne Einheiten zu überprüfen, wurde anschließend für jede von ihnen die Standardabweichung als Maß für die Streuung dieser Anteile berechnet. Dabei ergab sich

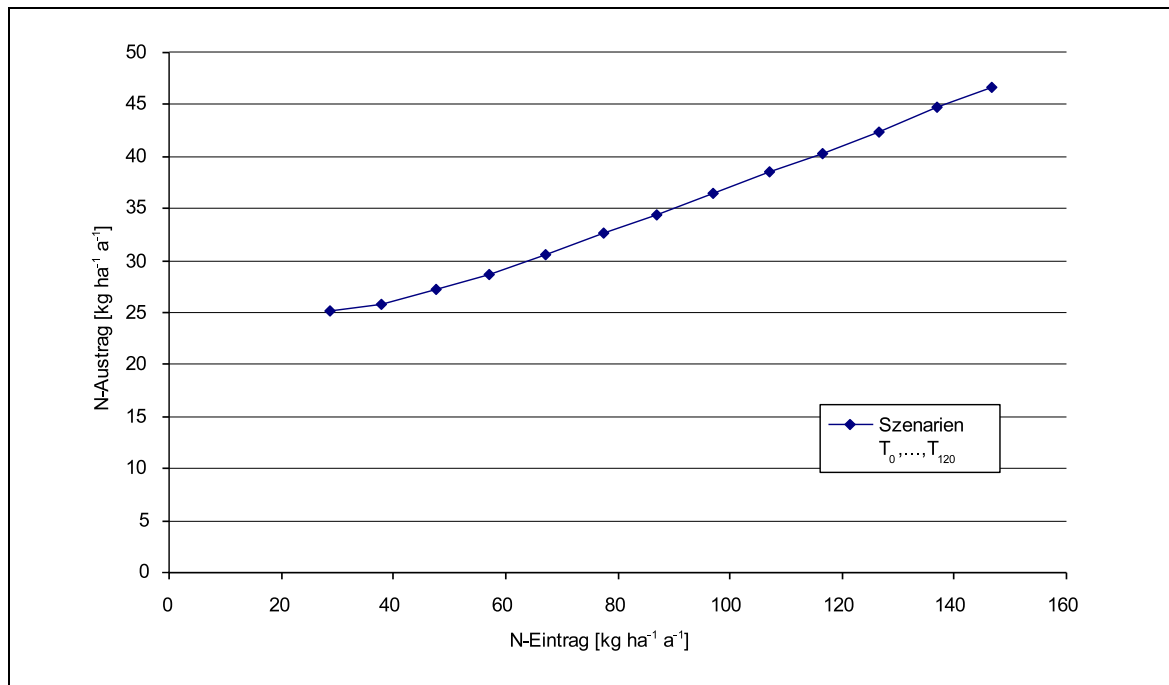


Abbildung 3.11: Mittlere Ein- und Austräge von Stickstoff für die Szenarien T_0, \dots, T_{120}

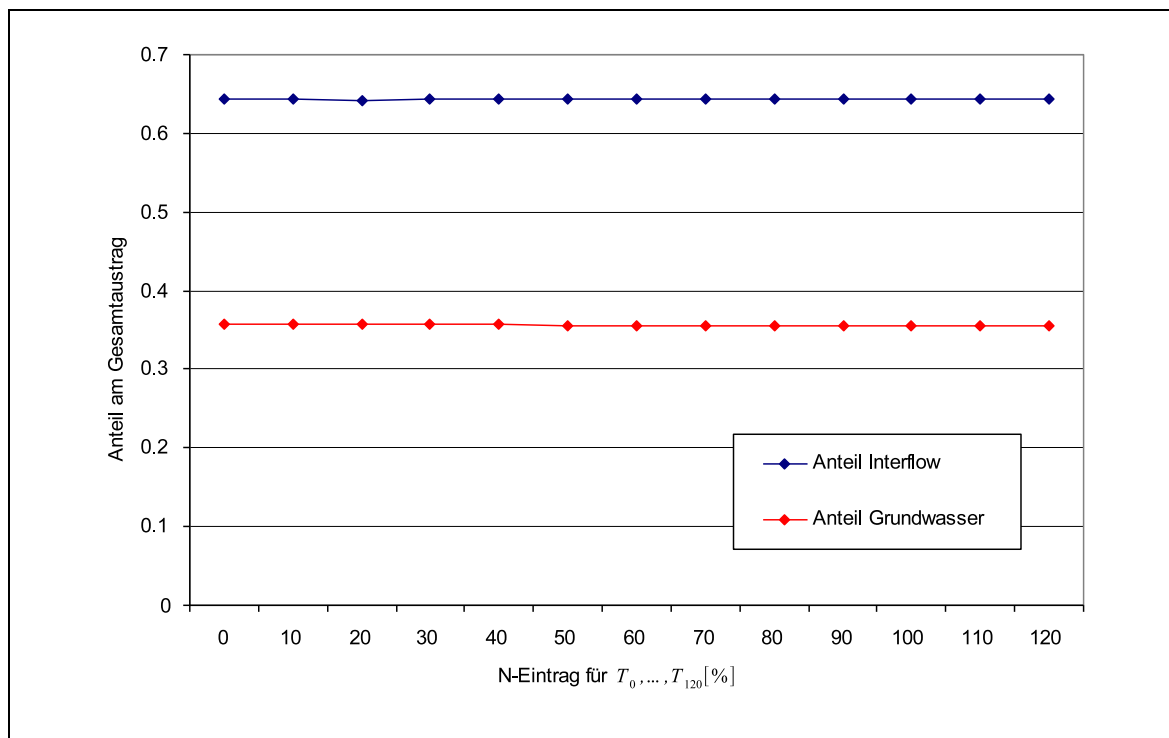


Abbildung 3.12: Durchschnittliche Anteile von Stickstoff in Interflow und Grundwasserabfluss für die Szenarien T_0, \dots, T_{120}

eine über alle Einheiten gemittelte Standardabweichung $\bar{\sigma}$ von

$$\bar{\sigma} = 0,009. \quad (3.4.9)$$

Eine genauere Untersuchung der Ergebnisse zeigte jedoch, dass bei ca. 75 % aller Einheiten der N-Austrag über nur einen der beiden Abflusspfade erfolgte. Verantwortlich dafür sind geologische Parameter sowie die Hangneigungen der Einheiten, die je nach Ausprägung einen vom N-Eintrag unabhängigen Abflusspfad im Modell bewirken. Für die entsprechenden Einheiten sind konstante Kantengewichte für Interflow- und Grundwasserkanten in jedem Fall gerechtfertigt.

Um einen Hinweis auf die Varianz der Abflussanteile bei den übrigen Einheiten zu erhalten, die sowohl Interflow als auch Grundwasserabfluss produzieren, wurde nochmals der Mittelwert der Standardabweichungen berechnet. Dabei blieben Einheiten unberücksichtigt, deren N-Austrag für alle Szenarien über einen einzigen Abflusspfad erfolgte. Die mittlere Standardabweichung betrug in diesem Fall

$$\bar{\sigma} = 0,023. \quad (3.4.10)$$

Dieses Ergebnis erlaubt die Schlussfolgerung, dass die durch WASMOD simulierten Verhältnisse zwischen den über Interflow und den über Grundwasserabfluss abgegebenen Stickstoffanteilen als konstant angesehen werden können. Die bei einigen räumlichen Einheiten auftretenden geringfügigen Schwankungen in diesem Verhältnis können vernachlässigt werden.

Die Ermittlung der Gewichte von Interflow- und Grundwasserkanten der inneren Neuronen erfolgte hierbei aus dem durchschnittlichen Verhältnis zwischen Interflow- und Grundwasserabfluss über alle Szenarien $\overline{T_0}, \dots, \overline{T_{120}}$ der entsprechenden räumlichen Einheiten. Die Gewichte der Düngekanten aller Neuronen wurden mit den absoluten N-Einträgen auf den jeweils repräsentierten räumlichen Einheiten initialisiert.

3.4.5 Schnittstellen zwischen WASMOD und HydroNet

Der Datenaustausch zwischen dem Modell WASMOD und dem HydroNet erfolgte auf Dateisystemebene. Für die Erzeugung des HydroNet waren dabei folgende Dateien relevant:

1. eine Parameterdatei, welche die Eigenschaften aller räumlichen Einheiten (unter anderem Landnutzung und Flächengröße) sowie deren topologische Verknüpfungen beinhaltet und
2. eine Reihe von WASMOD-Ergebnisdateien, welche für die Simulation eines Jahres pro räumlicher Einheit den N-Eintrag sowie die dazugehörigen N-Austräge über Grundwasserabfluss und Interflow enthielten.

Auf Grundlage der Parameterdatei wurde zunächst die Netzwerktopologie des HydroNet erzeugt und anschließend die Aktivierungsfunktionen aller Neuronen berechnet. Für jedes der dabei benötigten N-Ein- und N-Austräge wurden entsprechend den Ausführungen im letzten Abschnitt Simulationen mit WASMOD durchgeführt, welche die szenarienabhängigen Austräge für alle räumlichen Einheiten

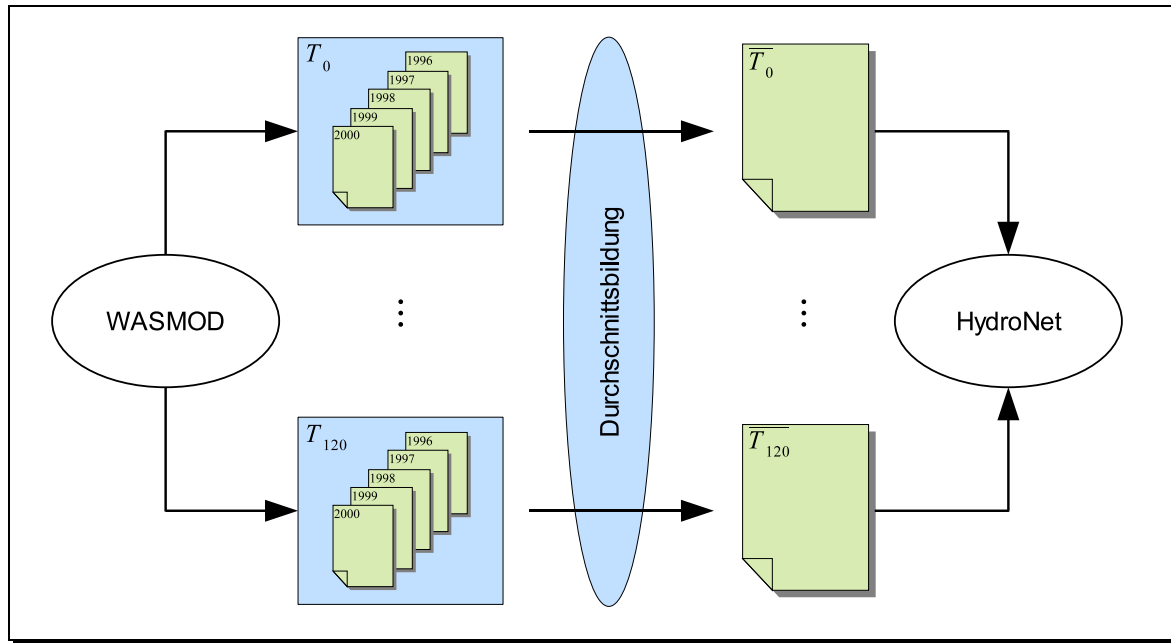


Abbildung 3.13: Ermittlung der Eingaben $\overline{T}_0, \dots, \overline{T}_{120}$ für das HydroNet aus fünfjährigen Fruchtfolgen

ten zum Ergebnis hatten. Für jedes der dreizehn Szenarien T_0, \dots, T_{120} ergaben sich dabei Durchschnittswerte ($\overline{T}_0, \dots, \overline{T}_{120}$) über die fünf modellierten Fruchtarten (Abbildung 3.13). Diese dienten schließlich zur Ermittlung der Aktivierungsfunktionen.

3.5 Simulation des Ist-Szenarios mit dem HydroNet

Auf der Grundlage der Vorprozessierungsdaten für WASMOD wurde zunächst ein HydroNet mit insgesamt 14791 Neuronen und 44367 Kanten erzeugt. Für die Interflow- und Grundwasserkanten erfolgte entsprechend der Ausführungen im vergangenen Abschnitt die Berechnung und Zuweisung der Gewichtsparameter. Für jede räumliche Einheit im Einzugsgebiet wurde aus Stützstellen, die sich aus den Szenarien $\overline{T}_0, \dots, \overline{T}_{120}$ ergaben, die N-Austragsfunktion als Polyline angenähert (vgl. Abschnitt 2.8.2.1) und dem zugehörigen Neuron als Aktivierungsfunktion zugewiesen. Dem Eingabeneuron und dem Ausgabeneuron wurde entsprechend der in Abschnitt 2.6.1 beschriebenen Vorgehensweise die Identitätsfunktion zugewiesen.

Die Initialisierung der Düngekantengewichte erfolgte auf Basis der durchschnittlichen N-Einträge für die Ist-Szenarien der Jahre 1996 bis 2000. Anschließend wurde dem HydroNet die Eingabe 1 präsentiert und durch das Netz propagiert. Nach der Aktualisierung aller Aktivierungen betrug die Aktivierung des Ausgabeneurons

$$a_{u_{out}} = 224826, \quad (3.5.1)$$

der durch das HydroNet ermittelte Gesamtaustrag in den Vorfluter somit ebenfalls $224826 \text{ kg N a}^{-1}$. Zur Validierung wurde dieses Ergebnis dem durch WASMOD berechneten Gesamtaustrag aus dem betrachteten Einzugsgebiet in den zugehörigen Vorfluter gegenübergestellt. Dabei fand nicht der Eintrag eines einzigen Jahres, sondern der durchschnittliche Eintrag aus dem zur Ermittlung der Szenarien zugrunde gelegten Zeitraum (1996–2000) Berücksichtigung. Der mit WASMOD simulierte durchschnittliche N-Gesamtaustrag betrug dabei $218572 \text{ kg N a}^{-1}$, die Abweichung e_{out} zu dem vom HydroNet berechneten Eintrag betrug somit

$$e_{out} = 2,9 \%. \quad (3.5.2)$$

Um dieses Ergebnis auch flächendifferenziert zu bewerten und feststellen zu können, ob sich etwa Fehler einzelner Neuronen gegenseitig aufgehoben hatten, wurden in einem weiteren Validierungsschritt die durch WASMOD berechneten Austräge aller räumlichen Einheiten $s \in S$ den Aktivierungen der zugehörigen Neuronen u_s gegenübergestellt. Dabei ist zu beachten, dass die Netzeingaben und entsprechenden Aktivierungen der Neuronen im Allgemeinen nicht mit den Stützstellen übereinstimmen, die bei der Ermittlung der Aktivierungsfunktionen Verwendung fanden. So wurde zwar dem Szenario \overline{T}_{10} eine Düngung von 100 % des Bedarfs zugrunde gelegt, die Landnutzungsverteilung entsprach dabei jedoch nicht dem Ist-Szenario.

Abbildung 3.14 zeigt die Gegenüberstellung der vom HydroNet und WASMOD ermittelten Werte sowie ihren durch Regression ermittelten linearen Zusammenhang. Als Maß für die Güte der Abbildung der N-Austragsfunktionen wurde das Bestimmtheitsmaß r^2 herangezogen, da so die Qualität des (linearen) Zusammenhangs zwischen Aktivierungen und modellierten Werten bestimmt werden konnte. Der Pearson'sche Korrelationskoeffizient r ist dabei wie folgt definiert:

$$r = \frac{\sum_i^n ((x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}))}{\sqrt{\sum_i^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_i^n (y_i - \bar{y})^2}}. \quad (3.5.3)$$

Der Wertebereich von r ist das Intervall $-1, 1$. Für $r = -1$ und $r = 1$ spricht man von einem vollständigen linearen Zusammenhang, für $r = 0$ hingegen ist kein Zusammenhang festzustellen.

Die Auswertung der ermittelten Daten ergab für das Bestimmtheitsmaß einen Wert von

$$r^2 = 0,92. \quad (3.5.4)$$

Damit konnte gezeigt werden, dass die Abbildung der N-Austragsfunktionen durch die verwendeten Aktivierungsfunktionen mit sehr hoher Genauigkeit erfolgte. Die Regressionsgerade ließ sich durch die Gleichung

$$y = 1,021x - 0,791 \quad (3.5.5)$$

beschreiben. Insgesamt lässt sich somit feststellen, dass das HydroNet in der Lage ist, die durch WASMOD simulierten Austräge in den Vorfluter in zufriedenstellender Weise abzubilden.

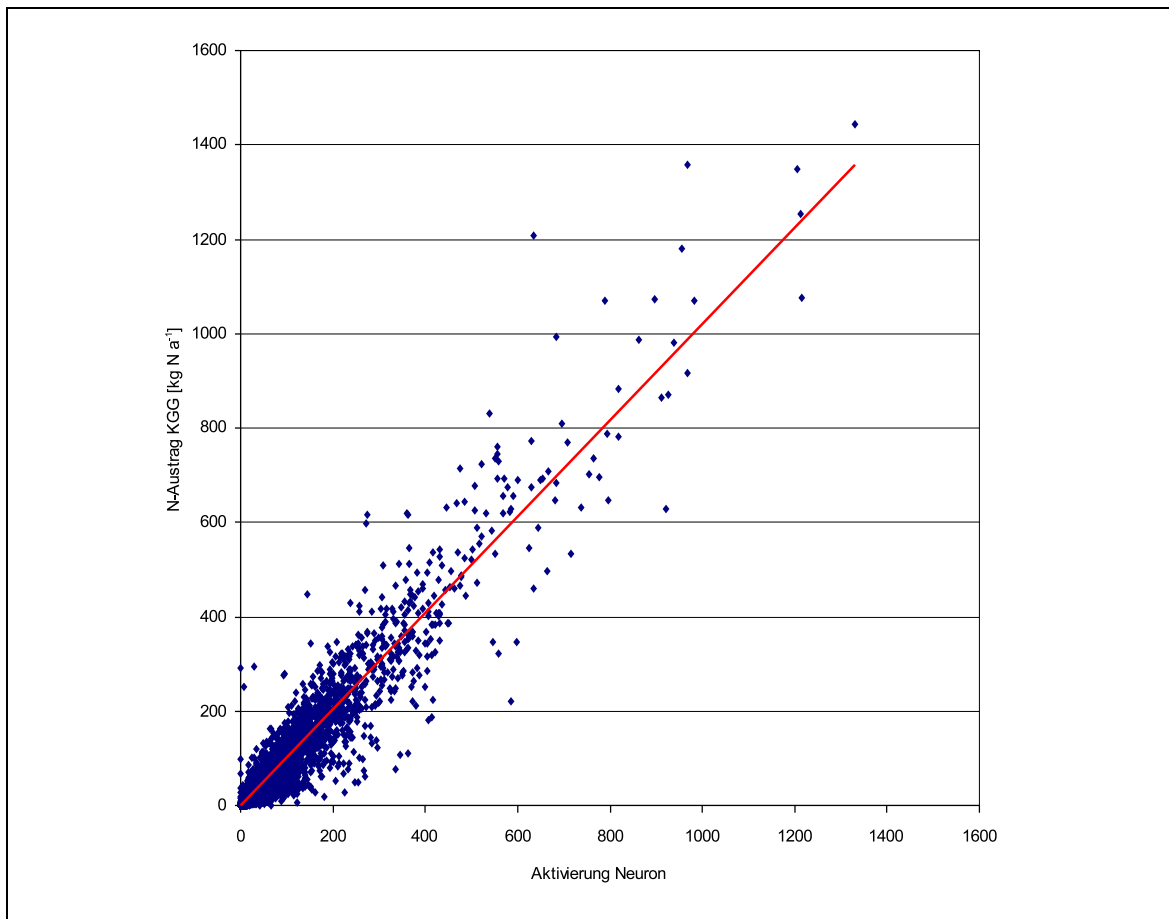


Abbildung 3.14: Gegenüberstellung der durch WASMOD berechneten KGG-Austräge und der Aktivierungen der Neuronen im HydroNet

3.6 Optimierung mit dem HydroNet

Nachdem gezeigt werden konnte, dass die Abbildung der Stickstoffausträge sowie der Stickstofftransport über laterale und vertikale Transportpfade erfolgreich nachgebildet werden kann, sollte auf das beschriebene HydroNet das BP*-Verfahren angewandt werden. Hierbei wurde zunächst eine Reduktion des N-Austrags und eine anschließende Validierung der Ergebnisse vorgenommen. Darüber hinaus sollte das Optimierungsverfahren herkömmlichen Ansätzen gegenübergestellt werden. Abschließend wurde das Verfahren, welches zunächst nur im Einzugsgebiet des Pegels Läwitz Anwendung fand, auf das Gesamtgebiet übertragen.

3.6.1 Optimierung des Stickstoffaustrags

Zunächst sollte überprüft werden, wie weit sich der vom HydroNet ermittelte N-Gesamtaustrag reduzieren lässt. Das Ziel dieser Reduktion war die Lösung des in Kapitel 2 thematisierten Stickstoffkonfigurationsproblems NCP_A . Zu diesem Zweck wurde der BP_A^* -Algorithmus verwendet (vgl. S 56). Dabei wurden als Lernparameter der maximal zulässige N-Gesamtaustrag z_E^{max} in den Vorfluter, die Lernrate σ , das Moment β , die Minstdifferenz ω zwischen den Netzwerkausgaben zweier aufeinanderfolgender Lernschritte sowie die maximal zulässige Abweichung ϵ der Netzwerkausgabe vom zulässigen N-Austrag wie folgt spezifiziert:

$$\begin{aligned} z_E^{max} &= 0 \\ \sigma &= 10^{-7} \\ \beta &= 0,9 \\ \omega &= 1 \\ \epsilon &= 100. \end{aligned}$$

Vor dem Start des BP_A^* -Algorithmus wurden die Düngekantergewichte mit dem Vektor \mathbf{n}^{opt} initialisiert. Die Düngekantergewichte aller inneren Neuronen entsprachen somit den N-Einträgen, die für die Bewirtschaftung der jeweils repräsentierten räumlichen Einheit optimal waren. Die Einzelwerte von \mathbf{n}^{opt} entsprachen dabei den durchschnittlichen N-Einträgen der Ist-Szenarien aus den Jahren 1996–2000.

Die Auswahl der Werte für die Lernparameter basierte auf Erfahrungen aus einer Reihe von Tests. Grundlage für σ und β waren in der Literatur empfohlene Werte (Gallant 1993, Nauck u. a. 1996). Gegenüber der auf Seite 55 formulierten zweiten Haltebedingung des BP*-Verfahrens erfolgte aus Gründen der Robustheit eine geringfügige Modifikation. Zur Berechnung der aktuellen Schrittweite wurde hier nicht die Differenz der Aktivierung $a_{u_{out}}$ des Ausgabeneurons zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten herangezogen. Stattdessen wurde hier der gleitende Mittelwert $\Delta a_{u_{out}}^n$

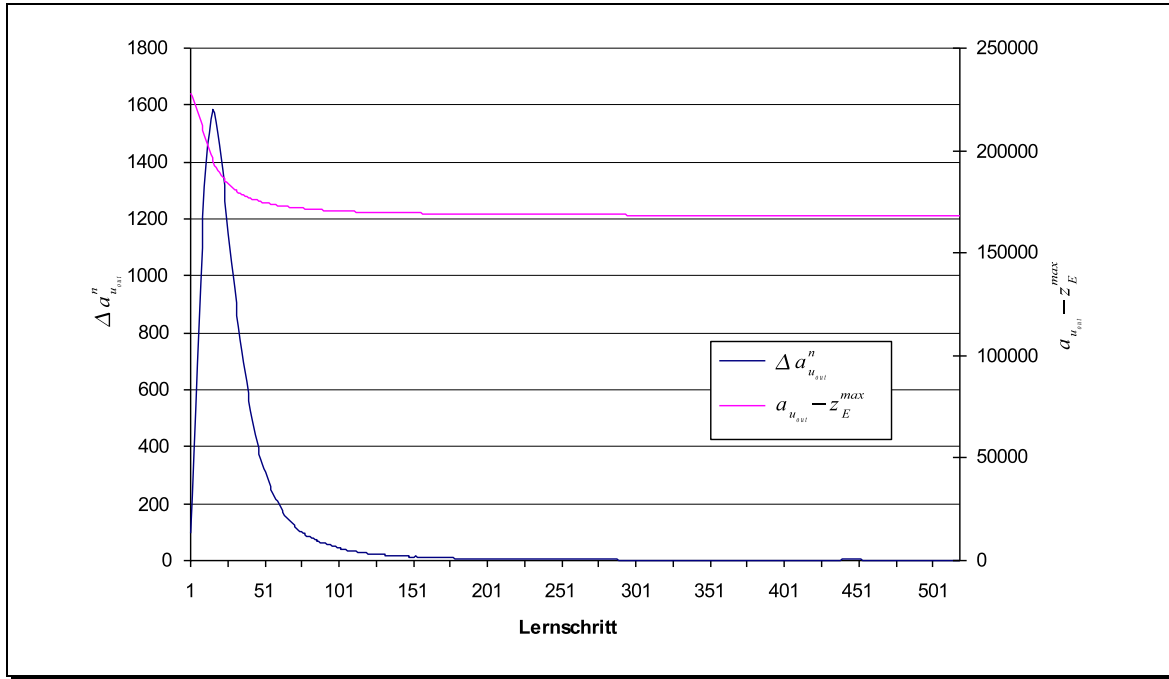


Abbildung 3.15: Durchschnittliche Schrittweite und Differenz zwischen tatsächlicher und vorgegebener Netzwerkausgabe während der Anwendung des BP_A^* -Algorithmus

dieser Differenz über die vorangegangenen zehn Schritte gebildet:

$$\Delta a_{u_{out}}^n := \frac{1}{10} \sum_{t=n-9}^n |a_{u_{out}}^{(t-1)} - a_{u_{out}}^{(t)}|, \quad (3.6.1)$$

wobei n den aktuellen Iterationsschritt bezeichnet. Somit konnte der Abbruch des Verfahrens in solchen Fällen verhindert werden, in denen die Differenz der Netzwerkausgaben zwischen zwei Iterationen nur zufällig den gegebenen Mindestwert ω unterschritt.

Wie im letzten Abschnitt beschrieben, betrug die Aktivierung des Ausgabeneurons vor Beginn der Gewichts Anpassungen $a_{u_{out}} = 224826$. Die Anwendung des BP_A^* -Algorithmus ergab folgende Werte für die Anzahl n der Iterationsschritte, die Differenz $a_{u_{out}} - z_E^{max}$ zwischen tatsächlicher und vorgegebener Netzwerkausgabe sowie die durchschnittliche Schrittweite $\Delta a_{u_{out}}^n$:

$$\begin{aligned} n &= 518, \\ a_{u_{out}} - z_E^{max} &= 168208, \\ \Delta a_{u_{out}}^n &= 0,98. \end{aligned}$$

Der BP_A^* -Algorithmus brach also bei einem Wert von $168208 \text{ kg N a}^{-1}$ für den N-Austrag in den Vorfluter ab. Dieses Ergebnis entspricht einer Reduktion um etwa 25 %. Der Abbruch erfolgte, weil die minimale Schrittweite ω unterschritten wurde. Der Verlauf der angegebenen Parameter während des BP_A^* -Algorithmus ist in Abbildung 3.15 dargestellt.

Von besonderem Interesse war die Frage, wie die Ergebnisse des BP_A^* -Algorithmus bei unterschiedlichen Vorgaben für den maximalen N-Austrag z_E^{max} variieren würden. Zu diesem Zweck wurde in einem anschließenden Schritt das Lernverfahren noch einmal durchgeführt, diesmal jedoch mit einem veränderten Wert für z_E^{max} , der statt der im ersten Durchgang erreichten 25 % nun einer Reduktion um 20 % des ursprünglichen Eintrags entsprach:

$$z_E^{max} = 179861. \quad (3.6.2)$$

Alle übrigen Parameter blieben unverändert. Die Ergebniswerte nach erfolgreicher Beendigung des BP_A^* -Algorithmus lauteten:

$$\begin{aligned} n &= 1128 \\ a_{u_{out}} - z_E^{max} &= 99 \\ \Delta a_{u_{out}}^n &= 1,46. \end{aligned}$$

Abbildung 3.16 zeigt die räumliche Darstellung der Ergebnisse des BP_A^* -Algorithmus für die Reduktionen des N-Gesamtaustrags um 25 % und 20 %. Da allen räumlichen Einheiten eine identische Landnutzung zugrunde liegt, können die Ergebnisse auch als Sensitivitätsgrade interpretiert werden. Diese beschreiben den Einfluss der Reduktion des N-Austrags einer räumlichen Einheit (KGG bzw. Schlag) auf den N-Gesamtaustrag in den Vorfluter. Dabei ist zu erkennen, dass im Falle der Reduktion um 25 % des Ursprungseintrages ein deutlich größerer Flächenanteil Düngereduktionen nahe 100 % aufweist. Weiterhin lässt sich feststellen, dass die Ergebnisse für die 20 %-Reduktion differenzierter ausfallen, d.h. mehr Flächen mit Reduktionen im Bereich von 10–90 % anzutreffen sind. Auffallend ist außerdem, dass trotz der maximal möglichen Reduktion des Gesamtaustrages um 25 % ein großer Anteil der Flächen keine bzw. eine sehr geringfügige Reduktion des N-Austrags von weniger als 10 % aufweist. Sehr gut zu erkennen sind in beiden Darstellungen die erhöhten N-Reduktionen auf Flächen in der Nähe von Fließgewässern. Dies ist unter anderem damit zu begründen, dass aus derartigen Flächen ausgetragene N-Frachten meist ohne weiteren Abbau ins Gewässer und somit in den Vorfluter gelangen.

Um die Unterschiede in den Ergebnissen der beiden Durchgänge genauer identifizieren zu können, wurden die resultierenden Düngekantengewichte direkt gegenübergestellt. Abbildung 3.17 zeigt einen Scatterplot der Einzelwerte. Jeder Punkt repräsentiert dabei ein inneres Neuron des HydroNet und somit je eine räumliche Einheit. Auf der x -Achse ist die Reduktion der Düngekantengewichte aller Neuronen dargestellt, welche sich bei der Reduktion des N-Gesamtaustrags um 20 % ergaben. Die y -Werte stellen analog die Ergebnisse der Reduktion um 25 % dar.

Die Grafik zeigt deutliche Unterschiede in den Anpassungen der einzelnen Düngekantengewichte in beiden Durchgängen, welche sich auch in einem relativ geringen Bestimmtheitsmaß zwischen beiden Datensätzen von

$$r^2 = 0,66$$

niederschlagen.

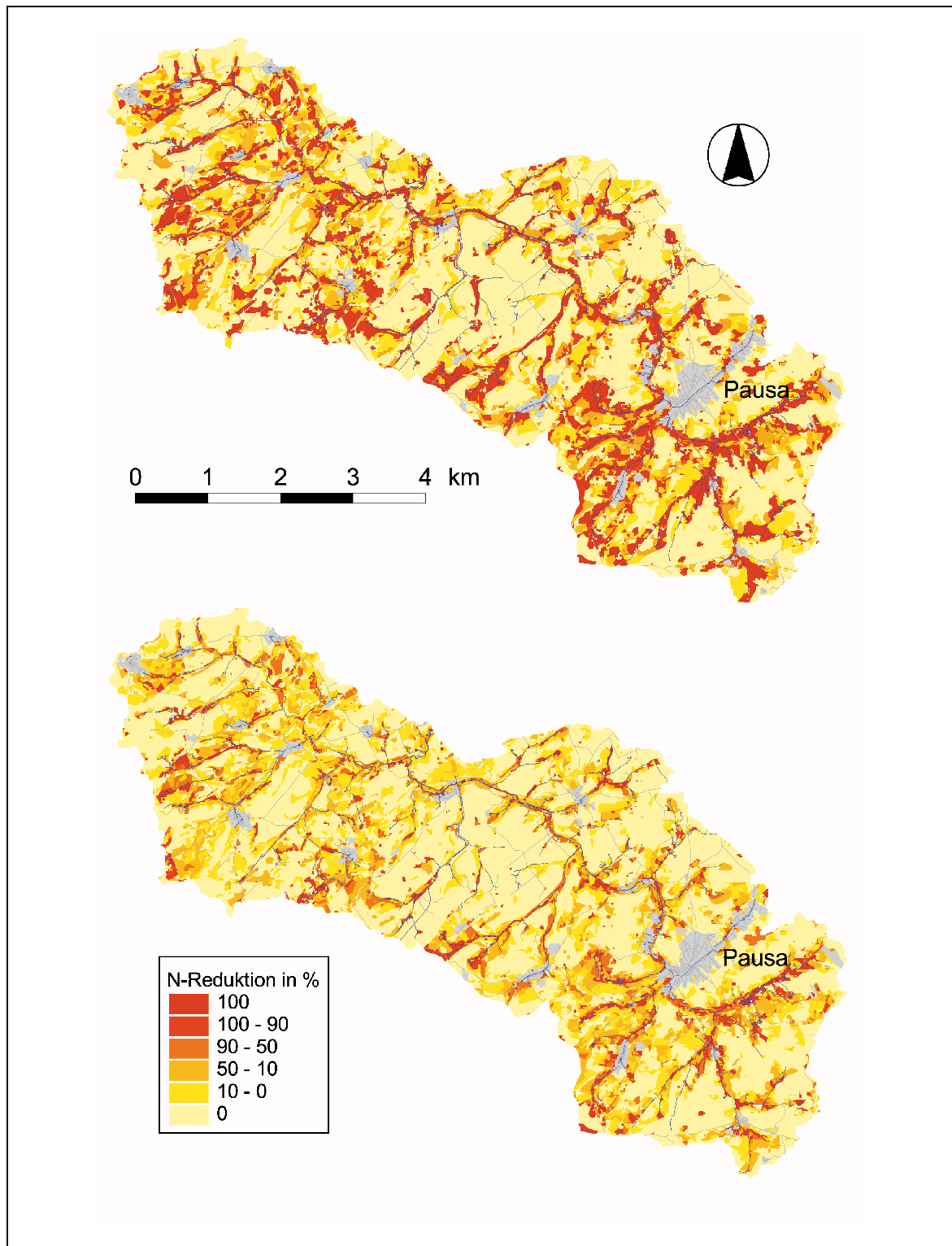


Abbildung 3.16: Ergebnisse des BP_A^* -Algorithmus bei Reduktion des ursprünglichen N-Gesamtaustrags in den Vorfluter um 25 % (oben) und 20 % (unten)

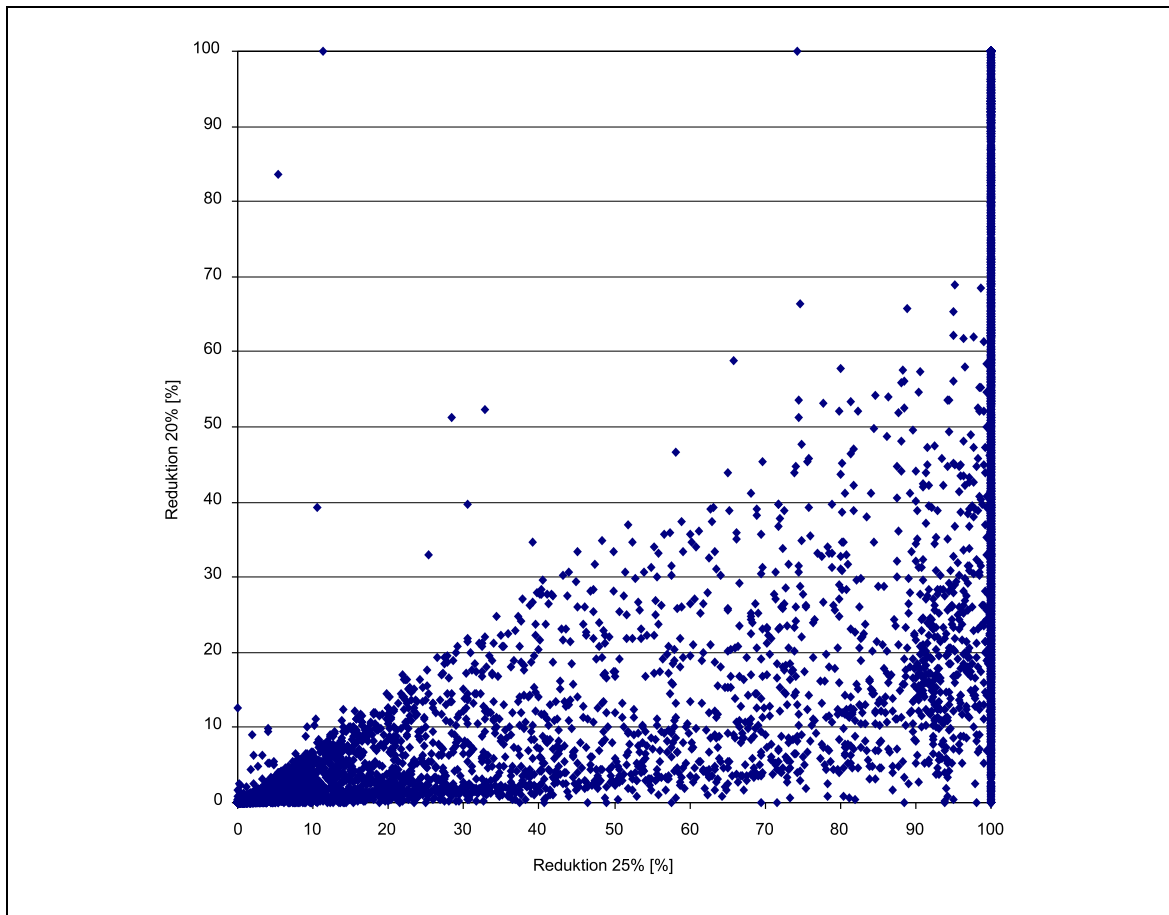


Abbildung 3.17: Gegenüberstellung der Ergebnisse des BP_A^* -Algorithmus bei Reduktionen des ursprünglichen N-Gesamtaustrags um 25 % und 20 %

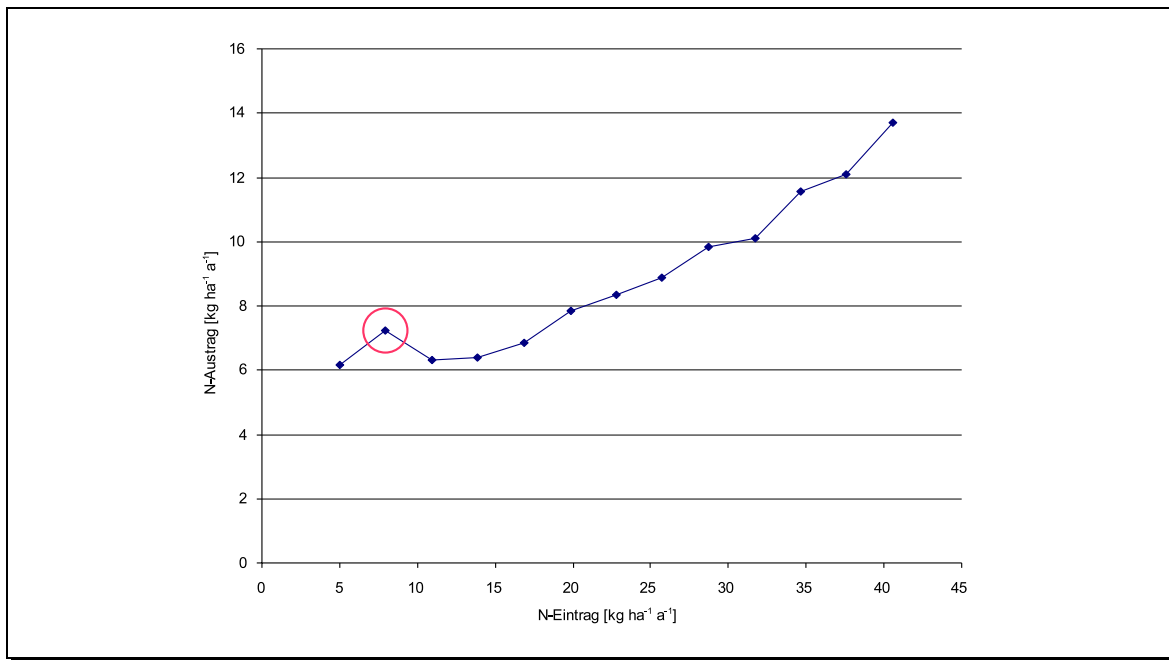


Abbildung 3.18: Aktivierungsfunktion und Stützstelle (markiert), die vom monoton steigenden Verlauf abweicht

Zu erkennen ist weiterhin, dass die Gewichte im Fall der 25 %-Reduktion verglichen mit der 20 %-Reduktion bis auf wenige Ausnahmen im gleichen oder stärkeren Maß verringert wurden. Diese Beobachtung entspricht auch der aus Satz 1 resultierenden Schlussfolgerung 2 (Seite 61), welche besagt, dass keines der Düngekantengewichte während des BP*-Verfahrens vergrößert wird. Somit können einzelne Gewichte bei einer Verringerung des N-Gesamtaustrages um 20 % niemals kleiner sein als im Fall einer Verringerung um 25 %, da sonst während des Verfahrens eine Vergrößerung stattfinden müsste. Dass dies im dargestellten Anwendungsfall für einige wenige Gewichte dennoch der Fall ist, kann zwei Ursachen haben:

1. Da das BP*-Verfahren keinen exakten Gradientenabstieg durchführt, werden für unterschiedliche Zielvorgaben nicht dieselben Gradienten verfolgt. Dieses Problem ist systemimmanent und kann durch die Auswahl einer geeigneten, möglichst kleinen Lernrate verringert, aber nicht ausgeschaltet werden. Gegen eine Verkleinerung der Lernrate spricht im Gegenzug eine damit einhergehende Verlangsamung des BP*-Verfahrens.
2. Die Aktivierungsfunktionen der betreffenden Neuronen weisen nicht den in der Theorie vorausgesetzten monoton steigenden Verlauf auf (Gleichung 2.7.17). Abweichungen davon betreffen selten die gesamte Funktion, sondern beruhen meist auf einzelnen Stützstellen, die etwa durch Fehler in WASMOD entstehen können. Abbildung 3.18 zeigt beispielhaft eine solche Funktion.

Der Vergleich der Ergebnisse beider Durchgänge wirft die Frage auf, wie groß der Anteil der räumlichen Einheiten mit gleichen oder ähnlichen Ergebnissen ist. Vor allem im Hinblick auf die Identifizierung von Flächen, die unabhängig von den Zielvorgaben als stark sensitiv bzw. gering sensitiv ausgewiesen werden können, sind hier allgemeingültigere Aussagen von Interesse. Zur Beantwortung

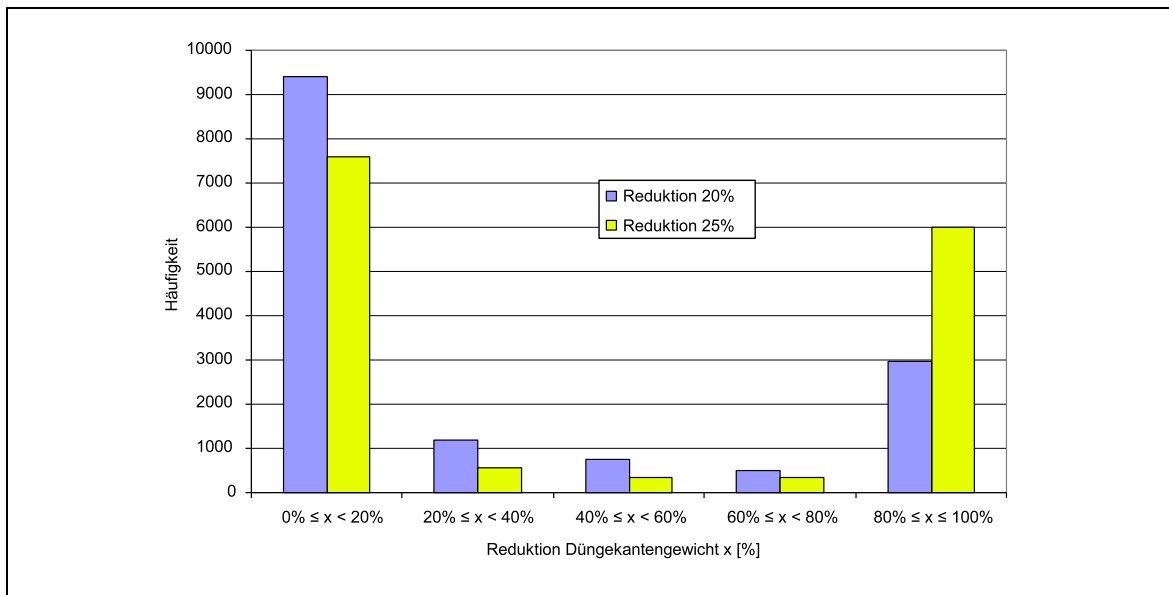


Abbildung 3.19: Anteile (Häufigkeiten) der Düngekantergewichte an verschiedenen Ergebnisklassen des BP_A^* -Algorithmus bei Reduktionen um 25 % und 20 %

dieser Frage wurde ein Histogramm erzeugt, welches die möglichen Reduktionen von Düngekantergewichten in Klassen unterteilt und diesen die Häufigkeit ihres Auftretens gegenüberstellt (Abbildung 3.19).

Zunächst ist dabei zu erkennen, dass für beide Gewichts Anpassungen ein überwiegender Teil der Kantergewichte entweder um weniger als 20 % oder aber um mehr als 80 % modifiziert wurde. Beim Vergleich der beiden BP_A^* -Anwendungen fällt auf, dass im Fall der Reduktion des N-Gesamtaustrages um 25 % etwa doppelt so viele Düngekantergewichte in starkem Maße ($\geq 80\%$) reduziert wurden, als bei der Reduktion um 20 %. Bei der 25 %-Reduktion wurden die Düngekantergewichte von 51 % aller Neuronen um weniger als 20 % reduziert, ein großer Anteil aller räumlichen Einheiten blieb somit nahezu unmodifiziert.

Um festzustellen, wie sich die Ergebnisse für einzelne Modelleinheiten (KGG) in Flächenanteilen niederschlagen, wurde ein zweites Histogramm erzeugt. Dieses stellt den Ergebnisklassen die Gesamtfläche aller räumlichen Einheiten gegenüber, deren Reduktion aus der betreffenden Klasse stammt (Abbildung 3.20). Die Darstellung zeigt, dass sich der Anteil der räumlichen Einheiten mit einer Reduzierung des N-Eintrags von weniger als 20 % auf 64 % erhöht, wenn ihre Flächengröße zugrunde gelegt wird. Diese räumlichen Einheiten, die aufgrund der geringen Änderung ihres N-Eintrags als gering sensitiv und damit nur wenig relevant für etwaige Bewirtschaftungsänderungen angesehen werden können, wurden neben anderen auch bei der Reduktion des N-Gesamtaustrages um 20 % ermittelt. Dass dies der Fall sein muss, ergibt sich ebenfalls aus der Monotonie der Fehlerfunktion (Satz 1, S. 59) und der daraus abgeleiteten Schlussfolgerung, dass die Düngekantergewichte während des BP^* -Verfahrens nicht vergrößert werden. Die maximal mögliche Reduktion des N-Gesamtaustrags und die Ermittlung von Neuronen, deren Düngekantergewichte nur geringfügig modifiziert wurden, kann somit als allgemeine Vorgehensweise bei der Ausweisung allgemein gering sensibler räumlicher

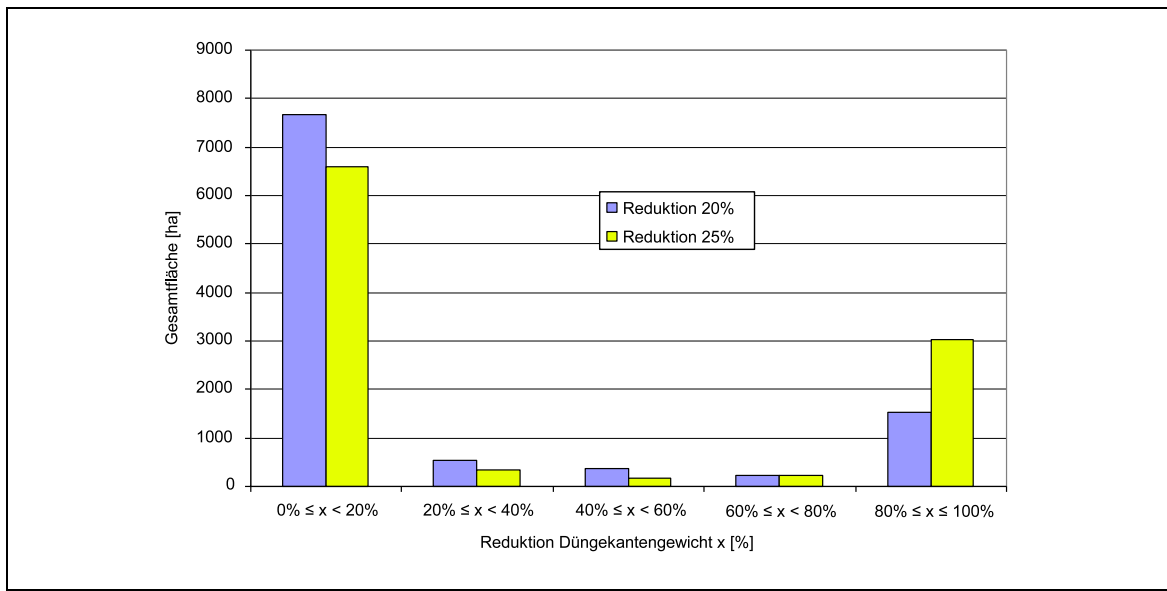


Abbildung 3.20: Anteile (Flächen) der Düngekantengewichte an verschiedenen Ergebnisklassen des BP_A^* -Algorithmus bei Reduktionen um 25 % und 20 %

Einheiten betrachtet werden. Andererseits lassen sich sensitive Einheiten, die für Bewirtschaftungsmaßnahmen allgemein eine hohe Relevanz besitzen, auf diesem Weg nicht ermitteln. Diese Einheiten können nur für jeweils fest vorgegebene Obergrenzen der N-Austräge in den Vorfluter mit Hilfe des BP_A^* -Algorithmus ermittelt werden.

Nach der Anwendung des BP_A^* -Algorithmus und der Auswertung der Ergebnisse stellte sich die Frage nach ihrer Gültigkeit. Dabei war nicht nur von Interesse, ob die prognostizierten N-Gesamtausträge, die sich aus den Änderungen der N-Einträge auf den räumlichen Einheiten ergaben, durch das Modell WASMOD bestätigt werden könnten. Zusätzlich musste auch geklärt werden, ob die Ergebnisse auch auf andere Zeiträume mit unterschiedlichen klimatischen Rahmenbedingungen übertragen werden konnten.

3.6.2 Validierung

Nach der Anwendung des entwickelten Verfahrens sollten seine Ergebnisse validiert werden. Die Validierung umfasste zunächst die Überprüfung der vom Optimierungsverfahren prognostizierten Ergebnisse. In einem zweiten Schritt sollte getestet werden, inwieweit sich diese Resultate robust gegenüber Änderungen des zugrunde liegenden Klimas verhalten.

3.6.2.1 Validierung der Ergebnisse

Da eine Validierung der Optimierungsergebnisse an im Gelände gemessenen Daten ausgeschlossen war, erfolgte diese mit Hilfe von WASMOD. Dazu wurden die aus dem BP_A^* -Algorithmus resul-

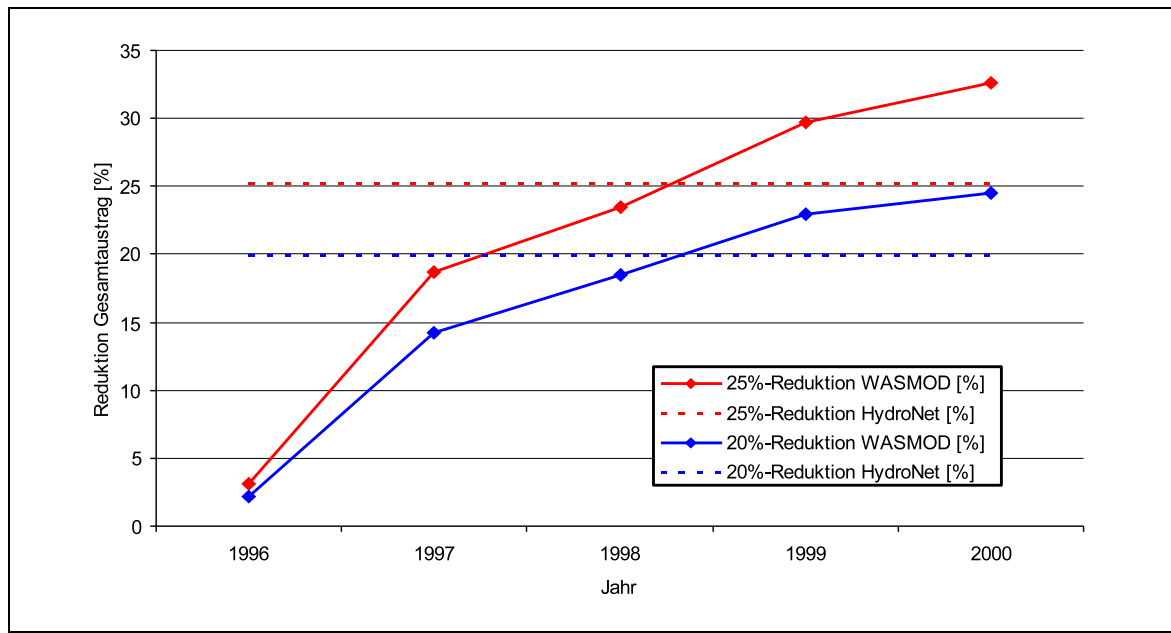


Abbildung 3.21: Durch WASMOD berechnete Reduktionen der N-Gesamtausträge auf der Basis von Ergebnissen des BP_A^* -Algorithmus für Reduktionen um 20 % und 25 %

tierenden Daten in die von WASMOD verwendeten Parameterdatensätze aller räumlichen Einheiten eingespeist. Dabei waren die ursprünglichen N-Einträge über Düngung für alle Einheiten um die Anteile verringert worden, die zuvor mit dem Lernverfahren ermittelt worden waren. Die Modellierung mit WASMOD erfolgte für den gleichen fünfjährigen Zeitraum, der auch schon bei der Ermittlung der Aktivierungsfunktionen zugrunde gelegt worden war. Gleiches galt für die mit WASMOD modellierte Landnutzung auf den räumlichen Einheiten.

Die Ergebnisse der Modellierung mit WASMOD zeigten, dass der prognostizierte N-Gesamtaustrag in den Vorfluter anhand der ermittelten Einzelreduktionen gut durch WASMOD nachvollzogen werden konnte. Zunächst wurden dabei die Ergebnisse der 25 %-Reduktion betrachtet. Der Mittelwert der in den fünf Jahren durch WASMOD berechneten Reduktion des N-Gesamtaustrags betrug für diesen Fall 23,2 %, gegenüber dem vom HydroNet prognostizierten Wert von 25,2 %. In einem zweiten Schritt wurden anschließend die Ergebnisse des HydroNet für die 20 %-Reduktion validiert. Hierbei berechnete WASMOD eine durchschnittliche Reduktion von 17,8 % gegenüber einer vom HydroNet ermittelten Einschränkung um 20 %. Abbildung 3.21 zeigt den Verlauf der von WASMOD berechneten Reduktionen für die einzelnen Jahre zusammen mit dem vom HydroNet prognostizierten Durchschnittswert. Am Ende des fünfjährigen Zeitraums werden die Ergebnisse des HydroNet durch die von WASMOD berechneten Rückgänge des N-Gesamtaustrages um 32,6 % (25 %-Reduktion) sowie um 24,5 % (20 %-Reduktion) sogar deutlich überschritten.

Die Abweichungen zwischen den Ergebnissen des HydroNet und den von WASMOD berechneten Reduktionen ist auf die im Vergleich zum HydroNet deutlich detailliertere Berücksichtigung verschiedener Rahmenbedingungen durch WASMOD zurückzuführen, als eine der wichtigsten Einflussgrößen ist hier das Klima zu nennen. Trotz der zum Teil starken Generalisierung der von WASMOD berück-

sichtigten Prozesse im HydroNet können die Ergebnisse der Validierung als sehr zufriedenstellend angesehen werden.

3.6.2.2 Einfluss des Klimas

Nach der Validierung der Ergebnisse des BP_A^* -Algorithmus sollte abgeschätzt werden, in welchem Umfang sich die im Gebiet auftretenden Klimaänderungen auf diese Ergebnisse auswirken können. Darüber hinaus sollte festgestellt werden, ob unterschiedliche klimatische Rahmenbedingungen einen Einfluss haben könnten auf das Verhältnis der ermittelten Reduktion des N-Eintrags einer räumlichen Einheit zu den entsprechenden Reduktionen auf anderen Einheiten. Die Beantwortung dieser zweiten Fragestellung war von großer Bedeutung, da sie nicht die Ergebnisse des BP_A^* -Algorithmus für einzelne räumliche Einheiten isoliert betrachtete, sondern die für die Ableitung von Handlungsempfehlungen wichtigen Verhältnisse der Ergebnisse unterschiedlicher Einheiten zueinander.

Im Mittelpunkt der Betrachtungen der Klimaänderungen stand die Niederschlagsmenge, da sie wesentlichen Einfluss auf N-Umsatz- sowie Transportprozesse im Boden ausübt und somit den N-Austrag erheblich beeinflusst (Fink 2004). Wie bereits ausgeführt wurde, wiesen die Klimaparameter im Zeitraum 1996–2000 für das Einzugsgebiet repräsentative Werte auf. Die für diese Jahre ermittelten Ergebnisse sollten daher mit denen aus zwei weiteren fünfjährigen Zeiträumen verglichen werden, die ein jeweils besonders trockenes sowie feuchtes Klima aufwiesen. Eine von Fink (2004) durchgeführte statistische Analyse der Niederschlagsmengen aus den zur Verfügung stehenden Klimadaten ergab, dass der Zeitraum 1979–1983 die trockenste, der Zeitraum 1989–1993 die feuchteste fünfjährige Periode war.

Die genannten Zeiträume wurden zugrunde gelegt, um auf der Basis der in Abschnitt 3.3 (S. 78) beschriebenen Landnutzungsszenarien Aktivierungsfunktionen für alle inneren Neuronen des HydroNet zu ermitteln. Dabei wurden jedoch nicht wie beschrieben 13 Szenarien für den N-Eintrag berücksichtigt, sondern lediglich die 6 Szenarien $T_0, T_{20}, T_{50}, T_{70}, T_{100}$ und T_{120} . Der Grund für diese Einschränkung war der erhebliche Aufwand, der für die Modellierung jedes dieser Szenarien betrieben werden musste. Auf der Grundlage der ermittelten Szenariendaten konnten anschließend zwei weitere neuronale Netze erzeugt werden. Um diese Netze mit dem ursprünglichen, auf mittleren Niederschlagsmengen basierendem HydroNet vergleichen zu können, wurden die Aktivierungsfunktionen dahingehend modifiziert, dass zu ihrer Ermittlung ebenfalls nur die zuvor genannten 6 Szenarien verwendet wurden. Das Ergebnis dieser Vorgehensweise bestand schließlich aus drei HydroNet-Instanzen $\mathcal{N}_{trocken}$, \mathcal{N}_{mittel} und \mathcal{N}_{feucht} , die sich ausschließlich in ihren Aktivierungsfunktionen bzw. den diesen zugrunde liegenden Stützstellen unterschieden. Die Berechnung der Netzwerkausgaben aller drei Netze für das Ist-Szenario ergab

- $a_{u_{out}} = 168313$ für $\mathcal{N}_{trocken}$,
- $a_{u_{out}} = 225213$ für \mathcal{N}_{mittel} und
- $a_{u_{out}} = 232870$ für \mathcal{N}_{feucht} .

Die Abweichung der Netzwerkausgabe von \mathcal{N}_{mittel} von dem in Abschnitt 3.5 beschriebenen Wert

($a_{u_{out}} = 224826$) ist durch die unterschiedliche Anzahl der den Aktivierungsfunktionen zugrunde liegenden Stützstellen zu erklären.

Auf jedes der drei Netze wurde im folgenden Schritt der BP_A^* -Algorithmus angewandt. Dabei sollte zunächst die ursprüngliche Netzwerkausgabe um 20 % reduziert werden. Abgesehen vom maximal zulässigen N-Gesamtaustrag z_E^{max} blieben die Lernparameter gegenüber den in Abschnitt 3.6.1 genannten Werten unverändert. Nach der Anwendung des BP_A^* -Algorithmus sollten die relativen Gewichtsänderungen der Düngekannten aller drei Netze miteinander verglichen werden. Dazu wurden die entsprechenden Änderungsvektoren paarweise gegenübergestellt. Als Maß für die Übereinstimmung wurde das Bestimmtheitsmaß gewählt, um die lineare Abhängigkeit der Ergebnisse voneinander zu bewerten.

In einem zweiten Durchgang wurde der BP_A^* -Algorithmus nochmals auf alle drei Netze angewandt, diesmal jedoch mit der Vorgabe, eine Reduktion der Netzwerkausgabe um 15 % herbeizuführen. Damit sollte untersucht werden, wie sich die Bestimmtheitsmaße gegenüber den im ersten Durchgang berechneten verändern würden. Die Ergebnisse beider Anwendungen des BP_A^* -Algorithmus sind in Tabelle 3.5 in Form der Bestimmtheitsmaße dargestellt, die sich aus dem paarweisen Vergleich der Gewichtsreduktionen für die drei Netzwerke ergaben.

Tabelle 3.5: Bestimmtheitsmaße für die Anwendung des BP_A^* -Algorithmus auf unterschiedliche Netzwerke

	$\mathcal{N}_{trocken}$ vs. \mathcal{N}_{mittel}	\mathcal{N}_{mittel} vs. \mathcal{N}_{feucht}	$\mathcal{N}_{trocken}$ vs. \mathcal{N}_{feucht}
15 %-Reduktion	0,78	0,77	0,81
20 %-Reduktion	0,71	0,71	0,76

Bei der Betrachtung der Bestimmtheitsmaße ist zunächst festzustellen, dass diese im Fall der 15 %-Reduktion bei allen drei Paarungen größer ist als im Fall der 20 %-Reduktion. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Größe der Unterschiede in den drei Ergebnissen abhängig ist vom Umfang der Gewichtsanpassungen und daher bei der 15 %-Reduktion nicht so stark zu Tage treten wie im Fall der 20 %-Reduktion. Insgesamt zeigen die Bestimmtheitsmaße eine recht hohe Übereinstimmung der relativen Gewichtsänderungen für die zugrunde liegenden Klimaszenarien.

Die Ergebnisse lassen die Vermutung zu, dass – zumindest für den vorliegenden Anwendungsfall – die Niederschlagsmenge nur einen geringen Einfluss auf die gegenüber anderen Einheiten relative Änderung des N-Eintrags einer räumlichen Einheit ausübt. Daher kann davon ausgegangen werden, dass die aus den Ergebnissen des BP_A^* -Algorithmus abgeleiteten Handlungsempfehlungen robust gegenüber den klimatischen Rahmenbedingungen sind, die der Erzeugung des HydroNet zugrunde lagen.

3.6.3 Vergleich mit herkömmlichen Ansätzen

Um die Leistungsfähigkeit des entwickelten Optimierungsansatzes zu dokumentieren, sollten die Ergebnisse, die sich aus der Bearbeitung einer praxisrelevanten Aufgabenstellung ergaben, denen herkömmlicher Ansätze vergleichend gegenübergestellt werden. Die Aufgabenstellung bestand in der Re-

duktion der N-Einträge auf einzelnen räumlichen Einheiten um eine vorgegebene N-Gesamtmenge. Die Verteilung der Einzelreduktionen über alle räumlichen Einheiten sollte dabei so erfolgen, dass daraus eine möglichst große Reduktion des N-Gesamtaustrags resultierte. Diese Aufgabenstellung entspricht in der Praxis der Suche nach Flächen, auf denen die Anwendung von Maßnahmen zur Reduktion des N-Austrags eine optimale Wirkung entfalten kann. Der Umfang dieser Maßnahmen ist dabei durch ein Budget beschränkt.

Neben dem BP*-Verfahren sollten folgende Ansätze betrachtet werden:

1. *Gleichverteilte Reduktion*: Dieses Verfahren sollte sich an der Vorgehensweise orientieren, die bisher von den Entscheidungsträgern der Thüringer Talsperrenverwaltung im betrachteten Einzugsgebiet praktiziert wird. Dabei war jedoch zu berücksichtigen, dass für die Auswahl von Maßnahmen zur Einschränkung des N-Eintrags sowie der Bestimmung der Flächen, auf denen diese Maßnahmen zur Anwendung kommen sollten, keine formalisierbaren Regeln existieren. Vielmehr ergeben sich Art und Umfang solcher Maßnahmen sowie der Ort ihrer Anwendung aus einer großen Anzahl von Einzelinformationen und Erfahrungen der verantwortlichen Personen. Um dennoch einen Vergleich mit dem BP_A*-Algorithmus durchführen zu können, wurden die vereinfachende Annahme getroffen, dass die Reduktion der N-Einträge für alle räumlichen Einheiten um den gleichen prozentualen Anteil erfolgt.
2. *Proportionale Reduktion*: Dieser Ansatz berücksichtigt die N-Austräge aus Einzelflächen, die durch eine Modellierung auf der Grundlage des Ist-Szenarios ermittelt werden. Die Reduktion der N-Einträge auf den Einzelflächen erfolgt dann proportional zum ermittelten N-Austrag dieser Flächen. Reiche (1991) beschreibt dieses Verfahren, um Flächen identifizieren zu können, auf denen Maßnahmen zur Reduktion von N-Austrägen zu konzentrieren sind.

Die Gegenüberstellung der Verfahren erfolgte anhand dreier Szenarien R_{10} , R_{20} und R_{30} , welche eine Reduktion der N-Einträge um jeweils 10 %, 20 % und 30 % des ursprünglichen Eintrags beinhalteten. Die Reduktionen bezogen sich dabei jeweils nur auf den anthropogenen Eintragsanteil, der Anteil der atmosphärischen Düngung blieb unverändert. Da die Kosten als Summe der N-Eintragsänderungen auf allen räumlichen Modelleinheiten definiert sind (Definition 2.2.6), können die den Szenarien zugeordneten Reduktionen auch als Budgets angesehen werden. Ausgangspunkt für die Gegenüberstellung waren wieder die durchschnittlichen N-Einträge für die Ist-Szenarien der Jahre 1996 bis 2000. Auf der Austragsseite wurden ebenfalls die jeweiligen Durchschnittsausträge des fünfjährigen Modellierungszeitraums berücksichtigt. Um eine direkte Vergleichbarkeit zu ermöglichen, wurden die aus den Verfahren resultierenden N-Gesamtausträge mit Hilfe des HydroNet ermittelt.

Zunächst wurde der N-Gesamtaustrag auf Basis einer gleichverteilten Reduktion für jedes der drei Szenarien berechnet. Die Reduktionen von N-Gesamteinträgen und -austrägen sind in Tabelle 3.6 dargestellt. Deutlich zu erkennen sind bereits hier die Unterschiede in den N-Gesamtausträgen.

Anschließend erfolgte eine Reduktion der N-Einträge aller räumlichen Einheiten proportional zu ihren modellierten N-Austrägen. Im HydroNet wurden hierfür die Aktivierungen aller inneren Neuronen nach der Berechnung des N-Gesamtaustrages für das Ist-Szenario verwendet, um die entsprechenden Düngekantergewichte zu reduzieren. Dies geschah in einem iterativen Verfahren, währenddessen alle Kantengewichte in jedem Schritt um einen jeweils kleinen Betrag proportional zur Aktivierung des

Tabelle 3.6: Reduktionen der N-Austräge für die Szenarien R_{10} , R_{20} und R_{30} auf Basis einer gleichverteilten Reduktion der N-Einträge

	R_{10}	R_{20}	R_{30}
Reduktion N-Gesamteintrag [kg N a ⁻¹]	92877	185827	278856
Reduktion N-Gesamtaustrag [kg N a ⁻¹]	7012	14642	21734
Reduktion N-Gesamteintrag [%]	7,9	15,8	23,8
Reduktion N-Gesamtaustrag [%]	3,1	6,4	9,5

zugehörigen Neurons verringert wurden. Nach jedem Schritt erfolgte ein Vergleich der resultierenden Änderung des N-Gesamteintrags mit dem durch die Szenarien R_{10} , R_{20} und R_{30} vorgegebenen Änderungen. Die Iteration wurde abgebrochen, sobald diese beiden Werte annähernd übereinstimmten. Dabei ergaben sich teilweise kleinere Unterschiede in den zugrunde gelegten Reduktionen der N-Gesamteinträge zwischen den drei Verfahren, die aber für den Vergleich keine Relevanz besitzen. Die Ergebnisse des Verfahrens für die drei Szenarien sind in Tabelle 3.7 dargestellt.

Tabelle 3.7: Reduktionen der N-Austräge für die Szenarien R_{10} , R_{20} und R_{30} auf Basis einer proportionalen Reduktion der N-Einträge

	R_{10}	R_{20}	R_{30}
Reduktion N-Gesamteintrag [kg N a ⁻¹]	92677	185856	278961
Reduktion N-Gesamtaustrag [kg N a ⁻¹]	14641	28130	38172
Reduktion N-Gesamteintrag [%]	7,9	15,8	23,8
Reduktion N-Gesamtaustrag [%]	6,4	12,3	16,7

Zum Abschluss musste das BP*-Verfahren angewandt werden,

Zum Abschluss wurde der Algorithmus BP_B^{*} (vgl. S. 57) verwendet, um damit das in Kapitel 2 beschriebene Problem NCP_B zu lösen und so die Gewichte der Düngekanten im HydroNet anzupassen. Der Unterschied dieses Algorithmus zu BP_A^{*} besteht in der Haltebedingung: während BP_A^{*} stoppt, sobald sich die Netzwerkausgabe ausreichend nah von oben an den maximal zulässigen N-Gesamtaustrag z_E^{max} angenähert hat, endet die Gewichts Anpassung beim BP_B^{*}-Algorithmus, sobald die Kosten, die sich aus der Gewichts Anpassung ergeben, einen Höchstwert z_K^{max} überschreiten. Die Kosten $z_K(\mathbf{w}^N)$ ergeben sich für den Vektor der aktuellen Düngekantengewichte \mathbf{w}^N sowie einen Vektor \mathbf{n}^{opt} , der für alle räumlichen Einheiten den für ihre jeweilige Bewirtschaftung optimalen, der Ist-Düngung entsprechenden N-Eintrag enthält, wie folgt (siehe Definition 2.2.6):

$$z_K(\mathbf{w}^N) = \sum_{i=1}^k (\mathbf{n}_i^{opt} - \mathbf{w}_i^N). \quad (3.6.3)$$

Dabei ist k die Anzahl der inneren Neuronen.

Bei der ersten Anwendung des BP_B^{*}-Algorithmus wurde für z_K^{max} derjenige Wert herangezogen, der einer Reduktion des anthropogenen N-Gesamteintrags um 10 % entsprach (Szenario R_{10}). Die Initialisierung der Gewichte erfolgte wie auch vor der Anwendung des BP_A^{*}-Algorithmus durch den

Vektor \mathbf{n}^{opt} . Die Werte der übrigen Verfahrensparameter entsprachen zunächst ebenfalls denen, die auch im BP_A^* -Algorithmus zum Einsatz gekommen waren:

$$\begin{aligned} z_K^{max} &= 93011 \\ \sigma &= 10^{-7} \\ \beta &= 0,9 \\ \omega &= 1 \\ \epsilon &= 100. \end{aligned}$$

Die Anwendung des BP_B^* -Algorithmus lieferte folgende Ergebnisse:

$$\begin{aligned} n &= 18 \\ z_K(\mathbf{w}^N) &= 87722 \\ \Delta a_{u_{out}}^n &= 1548. \end{aligned}$$

Bei der Betrachtung der Werte fällt auf, dass das Verfahren nach nur 18 Schritten der Gewichts-anpassung stoppte. Ebenfalls auffallend ist die sehr große Schrittweite $\Delta a_{u_{out}}^n$ beim Abbruch des Verfahrens. Die Ursache hierfür sind die großen partiellen Fehler der inneren Neuronen, die sich im Verfahren durch die Weiterleitung des vor allem zu Beginn der Gewichts-anpassungen sehr großen Fehlers am Ausgabeneuron ergeben. Während zu große Schrittweiten bei Verfahren auf der Basis von Gradientenabstieg generell das Problem mit sich bringen, dass der Gradient unter Umständen nicht mehr ausreichend genau verfolgt wird, kommt beim BP_B^* -Algorithmus noch eine weitere Schwierigkeit hinzu: die großen Änderungen im Netzwerkaustrag zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten sind bedingt durch ebenfalls sehr große Änderungen in den Düngekantengewichten. Im Interesse einer möglichst guten Annäherung der Kosten $z_K(\mathbf{w}^N)$ von oben an die Obergrenze z_K^{max} sind solch große Änderungen in den Kosten jedoch ungünstig. Ziel muss es daher sein, die Änderungen in den Düngekantengewichten bei Annäherung an die Kostenobergrenze möglichst klein zu halten. Dies geschah durch eine Verringerung der Lernrate σ auf einen Wert von 10^{-8} . Ein erneute Anwendung des Lernverfahrens ergab folgende Werte:

$$\begin{aligned} n &= 105 \\ z_K(\mathbf{w}^N) &= 92455 \\ \Delta a_{u_{out}}^n &= 162,92. \end{aligned}$$

Diese Ergebnisse zeigten eine deutlich bessere Annäherung der anfallenden Kosten $z_K(\mathbf{w}^N)$ an die maximalen Kosten z_K^{max} .

Für die verbleibenden Szenarien R_{20} und R_{30} wurde der BP_B^* -Algorithmus in ähnlicher Weise durchgeführt. Neben den maximal erlaubten Kosten wurden wiederum die Lernraten angepasst, um eine möglichst genaue Annäherung der anfallenden Kosten an die maximal zulässigen zu gewährleisten. Im Fall von R_{20} wurde hier ein Wert von $5 \cdot 10^{-7}$, im Fall von R_{30} ein Wert von 10^{-7} für die Lernrate

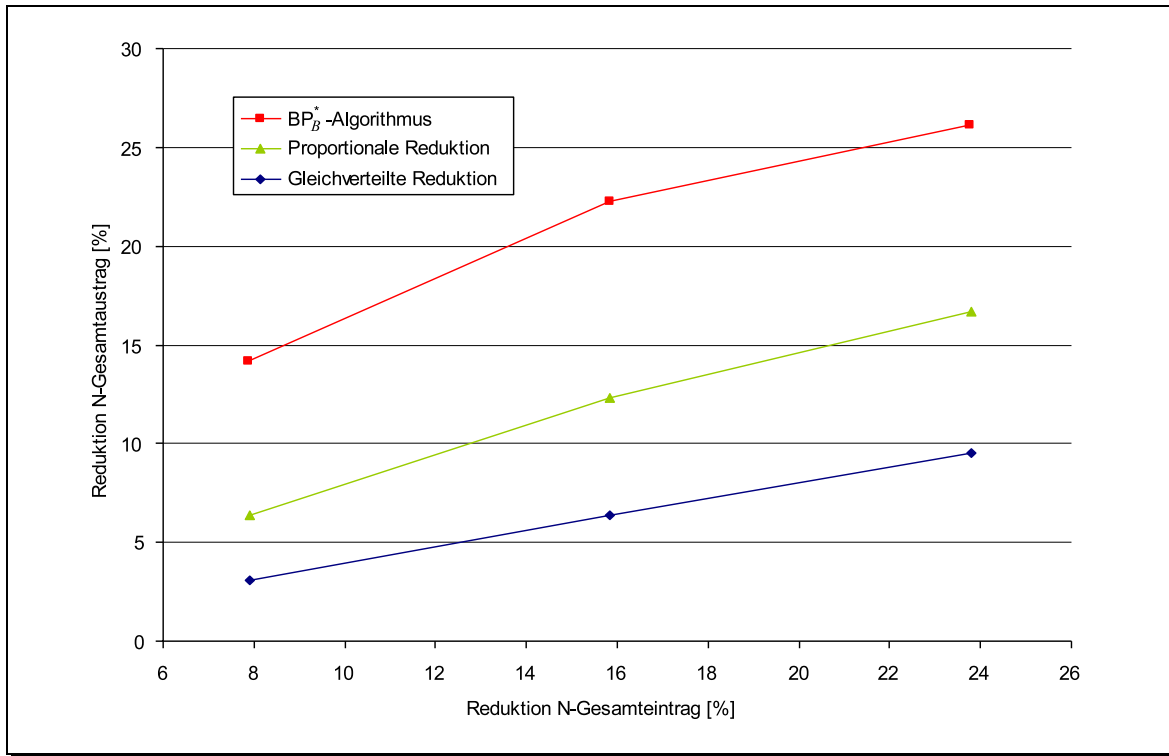


Abbildung 3.22: Vergleich der Ergebnisse des BP_B^* -Algorithmus mit denen einer proportionalen und einer gleichverteilten Reduktion der N-Einträge

σ gewählt.

Die Ergebnisse der Anwendung des BP_B^* -Algorithmus für die drei Szenarien sind in Tabelle 3.8 dargestellt. Neben den Kosten $z_K(\mathbf{w}^N)$ sind hier auch die sich daraus ergebenden Änderungen in der Aktivierung des Ausgabeneurons $\Delta a_{u_{out}}$ dargestellt.

Tabelle 3.8: Durch den BP_B^* -Algorithmus berechnete Reduktionen der N-Gesamteinträge $z_K(\mathbf{w}^N)$ und -austräge $\Delta a_{u_{out}}$ für die Szenarien R_{10} , R_{20} und R_{30}

	R_{10}	R_{20}	R_{30}
z_K^{max}	93011	186022	279033
$z_K(\mathbf{w}^N)$	92455	185804	278550
$\Delta a_{u_{out}}$	32425	50977	59785
Reduktion N-Gesamteintrag [%]	7,9	15,8	23,8
Reduktion N-Gesamtaustrag [%]	14,2	22,3	26,1

Ein Vergleich der Ergebnisse der drei Verfahren zeigt deutliche Unterschiede in den resultierenden Änderungen der N-Gesamtausträge. Abbildung 3.22 stellt die Ergebnisse für die Szenarien R_{10} , R_{20} und R_{30} direkt gegenüber. Dabei wurden nicht die absoluten Änderungen der Ein- und Austräge verglichen, sondern die auf das Ist-Szenario bezogenen relativen Änderungen.

Aufgrund der in Abschnitt 3.6.2.1 beschriebenen Validierung der Ergebnisse des BP^* -Verfahrens

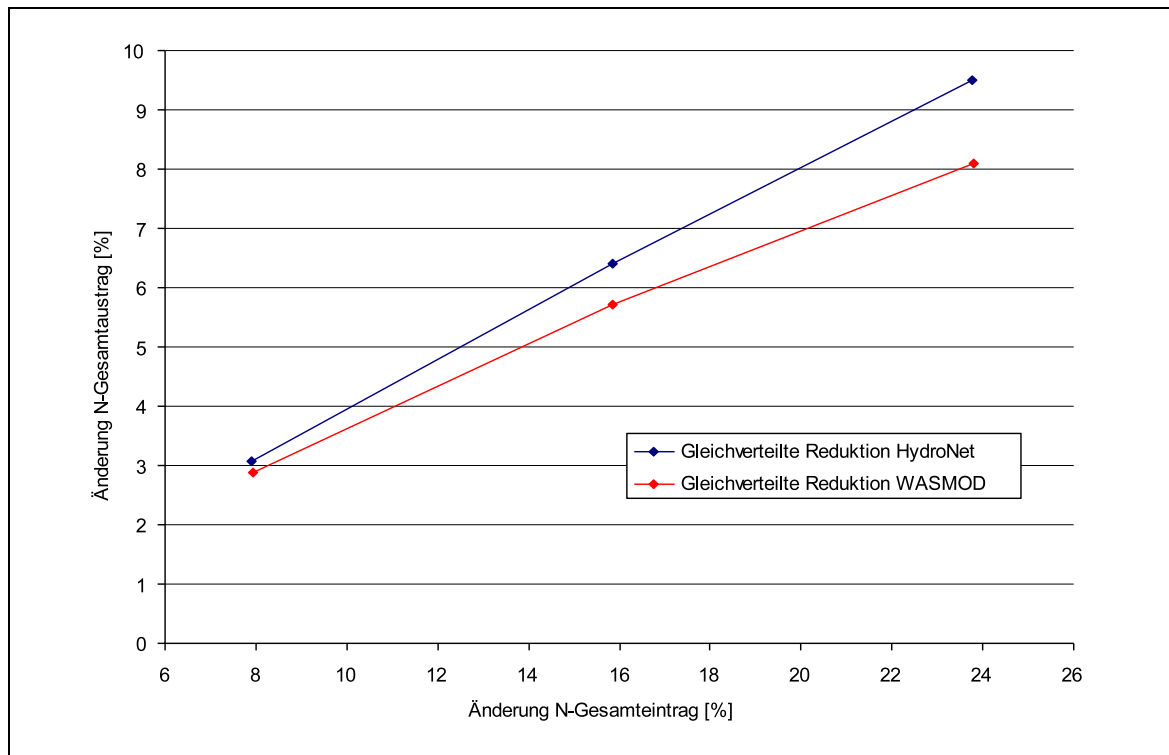


Abbildung 3.23: Durch WASMOD und HydroNet ermittelte N-Gesamtausträge für den Fall einer gleichverteilten Reduktion der N-Einträge

kann davon ausgegangen werden, dass die durch das HydroNet ermittelten N-Gesamtausträge, die sich aus den Ergebnissen der drei Verfahren ergaben, allenfalls geringfügig von den entsprechenden WASMOD-Ergebnissen abweichen. Zur Untermauerung dieser These sind in Abbildung 3.23 die von HydroNet und WASMOD ermittelten N-Austräge für den Fall der gleichverteilten Änderung der N-Einträge gegenübergestellt.

Auch unter der Berücksichtigung möglicher Abweichungen zwischen den Ergebnissen von HydroNet und WASMOD zeigen die Resultate des Lernverfahrens eine deutliche Dominanz gegenüber einer gleichverteilten Reduktion der N-Einträge. Die in der Literatur häufig beschriebene proportionale Reduktion der N-Einträge, die sich aus der Berücksichtigung der einzelnen N-Austräge ergibt, schneidet im Vergleich ebenfalls deutlich schlechter ab. Die Überlegenheit des Lernverfahrens dürfte dabei vor allem auf die Berücksichtigung topologischer Informationen zurückzuführen sein. Im Vergleich zur proportionalen Reduktion des N-Eintrags werden vom BP_B^* -Algorithmus räumliche Einheiten begünstigt, die einen großen Teil des ausgetragenen Stickstoffs durch lateralen Stofffluss an benachbarte Einheiten spenden und somit einen weiteren N-Abbau ermöglichen. Auch wenn in der Praxis davon ausgegangen werden kann, dass eine Verteilung N-reduzierender Maßnahmen durch die Einbeziehung menschlicher Erfahrungen effizienter als bei gleichmäßiger oder proportionaler Verteilung allein erfolgt, ist aufgrund der Vielzahl zu berücksichtigender Parameter des betrachteten Einzugsgebietes eine Überlegenheit des BP_B^* -Algorithmus wahrscheinlich.

3.6.4 Anwendung im Gesamtgebiet

Nach erfolgreicher Anwendung und Validierung von HydroNet und BP*-Verfahren im Einzugsgebiet des Pegels Läwitz sollte die beschriebene Methodik auf das Gesamteinzugsgebiet des Talsperrensystems Weida-Zeulenroda übertragen werden. Aus diesem Grund wurde zunächst analog den Ausführungen in Abschnitt 3.4 ein HydroNet auf Basis aller räumlichen Modelleinheiten des Gesamtgebietes erstellt. Das Ergebnis bestand aus einem Netzwerk mit insgesamt 24414 Neuronen sowie 73236 Kanten. Zur Ermittlung der Aktivierungsfunktionen aller inneren Neuronen wurden wiederum die N-Einträge und N-Austräge von 13 verschiedenen Bewirtschaftungsszenarien herangezogen. Der mit Hilfe des HydroNet berechnete N-Gesamtaustrag in den Vorfluter betrug $359089 \text{ kg N a}^{-1}$. Dem gegenüber stand ein von WASMOD simulierter N-Gesamtaustrag von $369495 \text{ kg N a}^{-1}$, die Abweichung des HydroNet betrug somit 2,8 %.

Anschließend wurde der BP_A*-Algorithmus auf das HydroNet angewandt. Die Vorgehensweise orientierte sich dabei an der Anwendung im Einzugsgebiet des Pegel Läwitz, die Verfahrensparameter betragen somit:

$$\begin{aligned} z_E^{max} &= 0 \\ \sigma &= 10^{-7} \\ \beta &= 0,9 \\ \omega &= 1 \\ \epsilon &= 100. \end{aligned}$$

Das Verfahren brach nach 363 Schritten der Gewichts Anpassung wegen der Unterschreitung der Mindestschrittweite ϵ ab. Der vom HydroNet berechnete N-Gesamtaustrag in den Vorfluter betrug nun $280894 \text{ kg N a}^{-1}$. Die durch den BP_A*-Algorithmus erzielte Reduktion des Austrags betrug somit etwa 22 % des Ausgangswertes. Abbildung 3.24 (links) zeigt die räumliche Darstellung der Verfahrensergebnisse für die von den Neuronen repräsentierten Modelleinheiten.

Um aus den Ergebnissen für das Gesamtgebiet Entscheidungen ableiten zu können, mussten diese zuvor weiter aufbereitet werden. Ausgangspunkt waren dabei die Reduktionen des N-Eintrags aller räumlichen Modelleinheiten in Prozent vom ursprünglichen N-Eintrag. Zunächst wurden die Ergebnisse auf der Grundlage kleinster gemeinsamer Geometrien räumlich zusammengefasst. Grundlage dieser Aggregation waren die landwirtschaftlichen Nutzflächen im Gebiet, die bereits zur Geometrie-Ableitung herangezogen worden waren (vgl. Abbildung 3.10). Für eine gegebene Nutzfläche wurde die Reduktion des N-Eintrags berechnet, indem die N-Reduktionen aller zugehörigen räumlichen Modelleinheiten mit deren Fläche gewichtet aufsummiert und das Ergebnis anschließend durch die Gesamtfläche dividiert wurde.

In einem weiteren Schritt der Nachbearbeitung wurden die Nutzflächen auf der Grundlage der N-Reduktion klassifiziert, um für Entscheidungsträger bei der Thüringer Talsperrenverwaltung Aussagen über die zu erwartende Wirksamkeit von stickstoffreduzierenden Maßnahmen auf den Nutzflächen bereitzustellen. Zu diesem Zweck wurden fünf Klassen „sehr gering“, „gering“, „mittel“, „hoch“ und „sehr hoch“ gewählt. Die Zuordnung der Nutzflächen zu diesen Klassen erfolgte zum einen unter

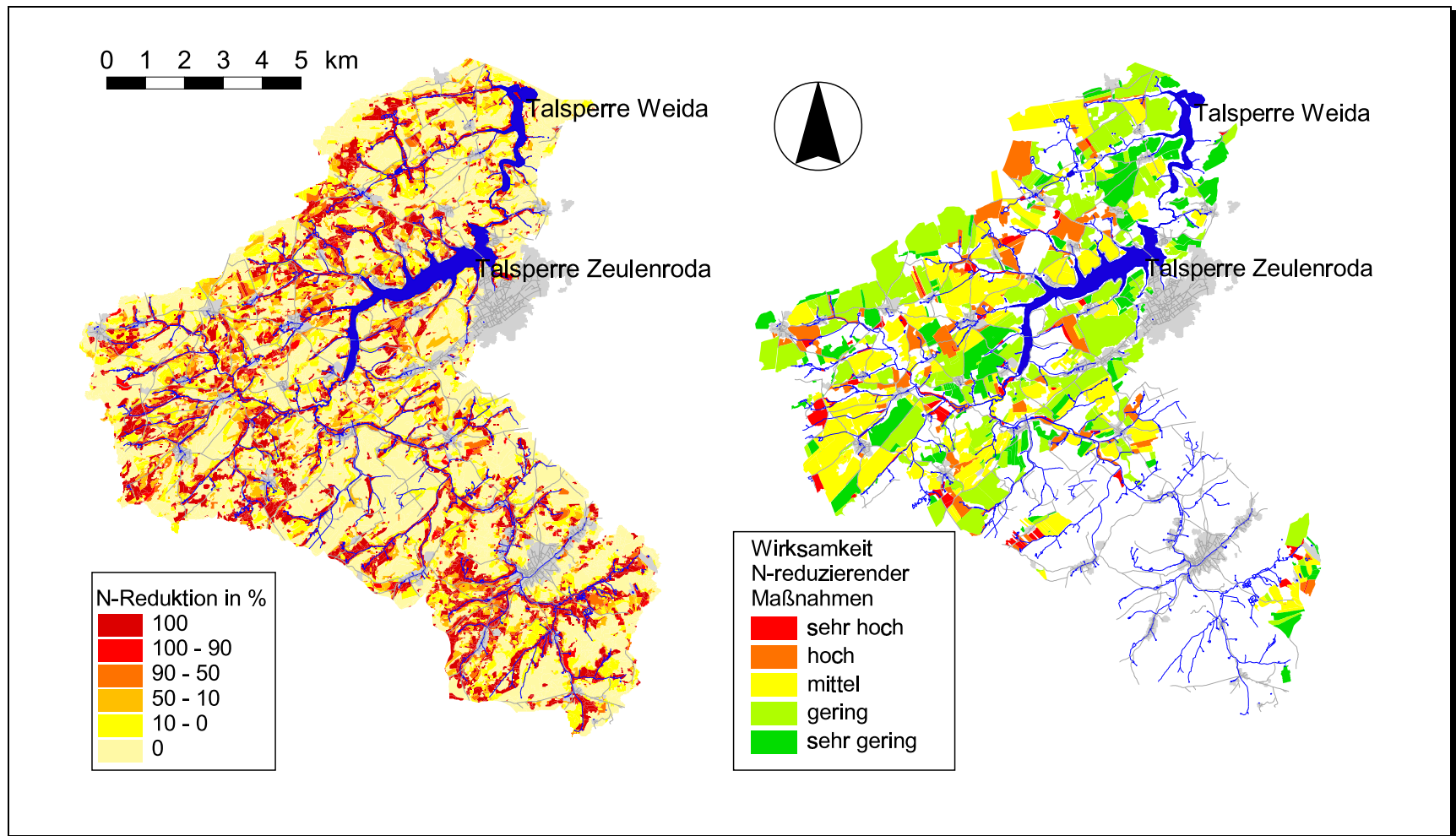


Abbildung 3.24: Ergebnisse der Anwendung des BP_A-Algorithmus auf das Gesamtgebiet für räumliche Modelleinheiten (links) und landwirtschaftliche Nutzflächen (rechts)

Tabelle 3.9: Klasseneinteilung der N-Reduktionen für Nutzflächen im Gesamtgebiet

Klasse	Reduktion [%]
sehr gering	0–5
gering	5–20
mittel	20–50
hoch	50–80
sehr hoch	80–100

der Maßgabe, eine möglichst gleichmäßige Verteilung der Ergebnisse zu den Klassen zu erzielen. Darüber hinaus sollten verschiedene Präferenzen der Entscheidungsträger Berücksichtigung finden. So war beispielsweise eine Klassengrenze bei 50 % N-Reduktion von Interesse, da oberhalb dieses Wertes ein wirtschaftlicher Anbau von Feldfrüchten unwahrscheinlich ist. Tabelle 3.9 zeigt die Zuordnung der Ergebnis-Intervalle zu den Klassen im Detail. Die zugehörige grafische Darstellung der Verfahrensergebnisse auf Grundlage landwirtschaftlicher Nutzflächen befindet sich in Abbildung 3.24 (rechts).

3.7 Praktische Umsetzung der entwickelten Verfahren

3.7.1 Implementierung

Vor der Anwendung des HydroNet und des zugehörigen Lernverfahrens erfolgte zunächst eine entsprechende objektorientierte Implementierung in *Java*. Grundlage hierfür war die Java 2 Plattform in der Standard Edition, Version 1.4.1 (SUN Microsystems 2003). In einem zweiten Schritt wurde eine grafische Benutzerschnittstelle entwickelt, welche bei

- der Erzeugung eines HydroNet,
- der Anwendung der Lernverfahren sowie
- der Auswertung der Ergebnisse

Unterstützung leisten kann. Die hierbei verwendeten Softwarebibliotheken umfassten neben der standardmäßigen Java-Klassenbibliothek eine Reihe unveröffentlichter Klassen zur Visualisierung und Manipulation geografischer Daten, die am Lehrstuhl für Geoinformatik, Geohydrologie und Modellierung der Friedrich-Schiller-Universität Jena entwickelt wurden. Für die Annäherung von Polynomen an eine Menge von Stützstellen wurde eine Bibliothek verwendet, welche Verfahren zur nicht-linearen Regression auf Basis der Minimierung kleinster Fehlerquadrate implementiert (Lewis 2000).

Die entwickelten Klassen gliedern sich in verschiedene Pakete:

1. `main`: Dieses Paket umfasst allgemeine Basisklassen, unter anderem zur Bereitstellung der grafischen Oberfläche der Software.
2. `nn_model`: Hier werden sämtliche Klassen zur Implementierung des HydroNet zusammengefasst.

3. `wasmod`: Dieses Paket beinhaltet Klassen zur Einbindung des Modells WASMOD mit Hilfe des Java Native Interface.
4. `misc`: In diesem Paket sind Klassen zur Darstellung des Einzugsgebietes, zum Zugriff auf WASMOD-Parameterdateien sowie zur Repräsentation verschiedener Typen von Aktivierungsfunktionen zusammengefasst.
5. `oms`: Dieses Paket beinhaltet alle Klassen, die für den Datenaustausch zwischen HydroNet und bereits vorhandenen Komponenten zur Visualisierung und Manipulation benötigt werden.

Die wichtigsten der für die Implementierung des HydroNet verwendeten Klassen sind in Abbildung 3.25 dargestellt. Das UML-Klassendiagramm zeigt die Klasse `NN`, welche ein generisches vorwärtsgerichtetes neuronales Netz implementiert. Jedem Objekt dieser Klasse ist dazu je eine Menge von Instanzen der Klassen `Neuron` und `Link` assoziiert. Eine Reihe von Methoden von `NN` implementieren Grundfunktionalitäten neuronaler Netze wie etwa das Propagieren eines Eingabevektors durch das Netz mit dem Ergebnis eines Ausgabevektors (`propagate(input:Vector):Vector`). Die Objekte der Klasse `Link` verwalten je ein zugehöriges Start- und Zielneuron sowie einen Gewichtswert. Die Klasse `Neuron` stellt neben Informationen über die aktuelle Aktivierung eines Neurons auch den Zugriff auf eine assoziierte Aktivierungsfunktion zur Verfügung. Für deren Darstellung wurde zunächst nur ein Interface `ActivationFunction` bereitgestellt, um dieses anschließend mit Hilfe unterschiedlicher Klassen implementieren und so die im Verlauf der Arbeit getesteten Funktionstypen auf einfache Art und Weise einbinden zu können. Die zur Repräsentation der Funktionstypen implementierten Klassen besitzen Methoden zur Ermittlung ihrer Funktionswerte und zur Berechnung ihrer Ableitung. Die den Funktionen zugrunde liegenden Stützstellen werden in einer Matrix gespeichert, deren Methoden im Fall von Polynomen auch zur Ermittlung der Polynom-Parameter herangezogen werden können.

Für die Darstellung des HydroNet wurde eine weitere Klasse `HydroNet` von `NN` abgeleitet. Hier ist auch das auf einer Reihe von Besonderheiten des HydroNet aufbauende Lernverfahren implementiert, ebenso Methoden zum Speichern und Laden von `HydroNet`-Instanzen auf der Grundlage von XML-Dokumenten, zur Ermittlung der Aktivierungsfunktionen und Kantengewichte im HydroNet sowie zur Initialisierung der Düngekantengewichte mit Startwerten. Ein weiterer Unterschied zur Klasse `NN` besteht in der Verwendung einer speziellen Klasse zur Kantendarstellung (`HydroLink`), welche die Unterscheidung von Grundwasser- und Interflowkanten ermöglicht.

Neben den für die Umsetzung des Optimierungsverfahrens benötigten Klassen wurden weitere zur Bereitstellung einer Schnittstelle zur Modellierungssoftware WASMOD implementiert. Ziel war eine möglichst enge Einbindung des Stofftransportmodells in ein Gesamtsystem zur Modellierung, Optimierung und Ergebnisdarstellung. Da WASMOD als *Fortran77*-Implementierung vorlag, kam das Java Native Interface (JNI) zum Einsatz (Liang 1999). Dazu wurde zunächst die gesamte WASMOD-Implementierung über eine Funktion innerhalb einer nativen Bibliothek bereitgestellt. Die Kommunikation zwischen dieser Bibliothek und Java-Klassen wurde durch die Bereitstellung von C++-Vermittlungsfunktionen realisiert, die mit Hilfe des JNI die Wertübergabe zwischen Java-Instanzenvariablen der nativen WASMOD-Funktion umsetzen. Somit konnte das Stofftransportmodell über eine entsprechende Java-Klasse mit den notwendigen Eingabedaten zu versehen und seinen Ablauf zu steuern.

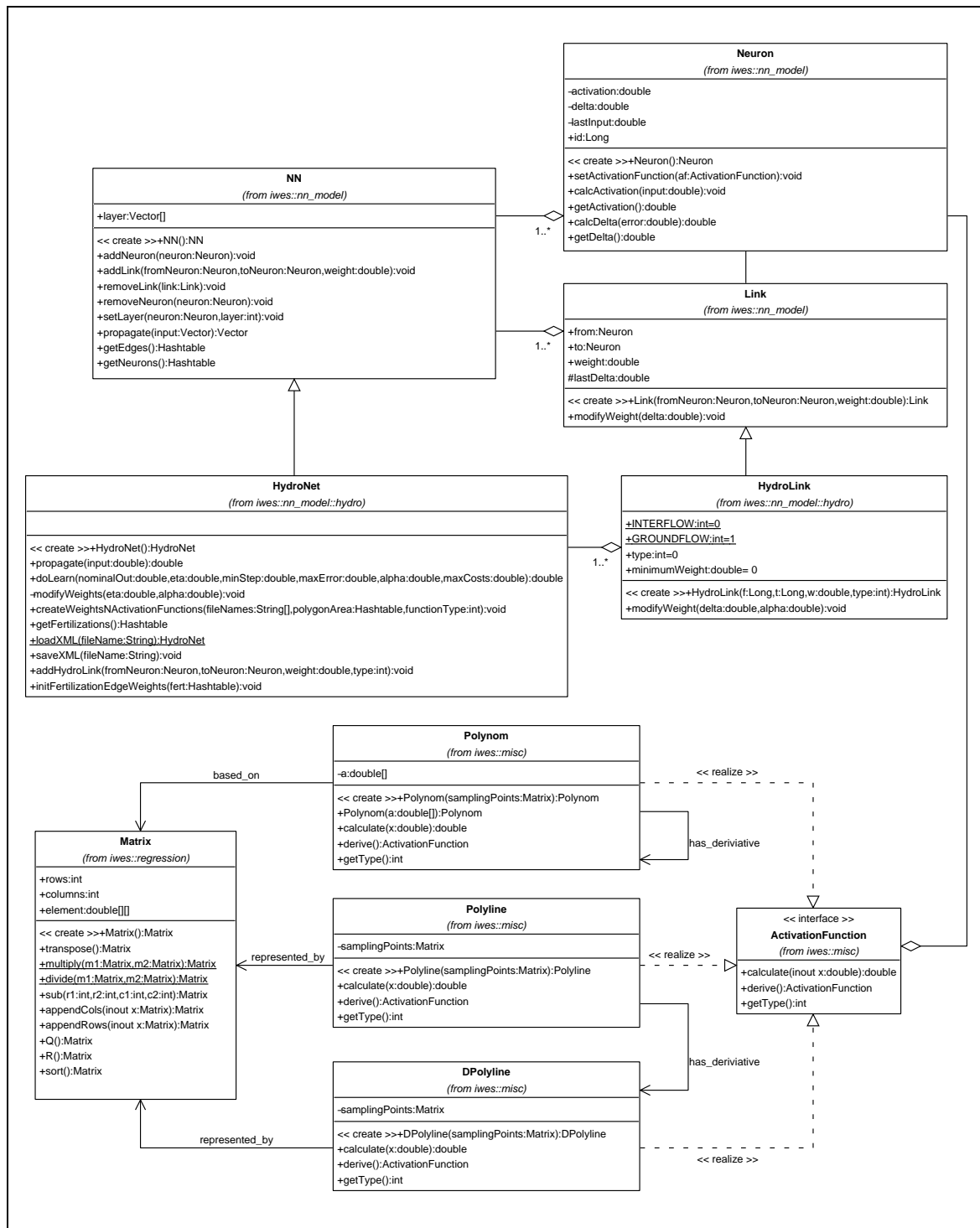


Abbildung 3.25: UML-Klassendiagramm der Basisklassen für die Implementierung des HydroNet

Die grafische Benutzerschnittstelle für das Verfahren wurde mit Hilfe des *Swing*-Paketes der *Java Foundation Classes* implementiert (Walrath u. a. 2004). Die entsprechenden Klassen wurden getrennt von denen zur Implementierung der WASMOD-Schnittstelle und des HydroNet entwickelt. Die Visualisierung der Ergebnisse erfolgte auf der Grundlage von Nutzflächen im Einzugsgebiet, für die entsprechende Daten aus geografischen Informationssystemen (GIS) vorlagen. Zur Darstellung mussten die Ergebnisse, welche für räumliche Modelleinheiten vorlagen, daher zunächst für jede Nutzfläche aggregiert werden. Die Zuordnung wurde dabei über entsprechende Zuordnungstabellen realisiert. Zur Darstellung der Daten wurde eine am Lehrstuhl entwickelte Klassenbibliothek eingesetzt, die eine Reihe grundlegender GIS-Funktionen implementiert. Über die Nutzflächen-Polygone erlaubt diese Oberfläche auch den Zugriff auf die assoziierten Neuronen, um deren Eigenschaften einzusehen und anzupassen.

Das Ergebnis der Implementierung der entwickelten Verfahren und ihrer Kopplung mit bestehenden Komponenten bestand in der Software IWES („Integriertes Wasserwirtschaftliches Entscheidungssystem“).

3.7.2 Anwendung zur Entscheidungsunterstützung

Die Anwendung der implementierten Software erfolgte im Rahmen einer Kooperation zwischen der Thüringer Talsperrenverwaltung und der Friedrich-Schiller-Universität Jena. Ein typisches Szenario der Anwendung der Software durch einen Benutzer soll im Folgenden kurz vorgestellt werden.

Die Aufgabe hierbei besteht in einer Reduktion des N-Gesamtaustrags aus dem Einzugsgebiet in den Vorfluter in größtmöglichem Umfang. Gesucht sind gemäß der Problemstellung NCP_A diejenigen Flächen, auf denen diese Reduktion mit einem minimalen Kostenaufwand realisiert werden kann. Nach dem Start von IWES stehen dem Benutzer zunächst drei verschiedene Grundfunktionalitäten der Software zur Auswahl (Abbildung 3.26):

1. Modellierung des N-Austrags in den Vorfluter mit WASMOD,
2. Ermittlung von Änderungen der N-Einträge auf Einzelflächen mit dem HydroNet,
3. Darstellung der Ergebnisse.

Die Modellierung mit WASMOD dient hierbei einerseits der Erzeugung von Stützstellen zur Ableitung der Aktivierungsfunktionen im HydroNet. Andererseits kann WASMOD zur Validierung der mit Hilfe des HydroNet ermittelten Reduktionen des N-Eintrags eingesetzt werden. Voraussetzung für beide Anwendungsfälle ist eine bereits erfolgte, externe Vorverarbeitung der von WASMOD benötigten Eingabedaten (vgl. Abbildung 3.10). Der Datenaustausch findet dabei auf Dateisystemebene statt (vgl. Absatz 3.4.5). Die IWES-Oberfläche ermöglicht hier die Vorgabe der von WASMOD berücksichtigten Startparameter (Abbildung 3.27 links).

Das Ergebnis der Simulation mit WASMOD besteht in einer Reihe von Ergebnisdateien, die im darauf folgenden Schritt zur Parametrisierung des HydroNet herangezogen werden. Mit Hilfe der zugehörigen Oberfläche (Abbildung 3.27 rechts) kann die Netzwerktopologie erzeugt, die Ausgangsdaten der

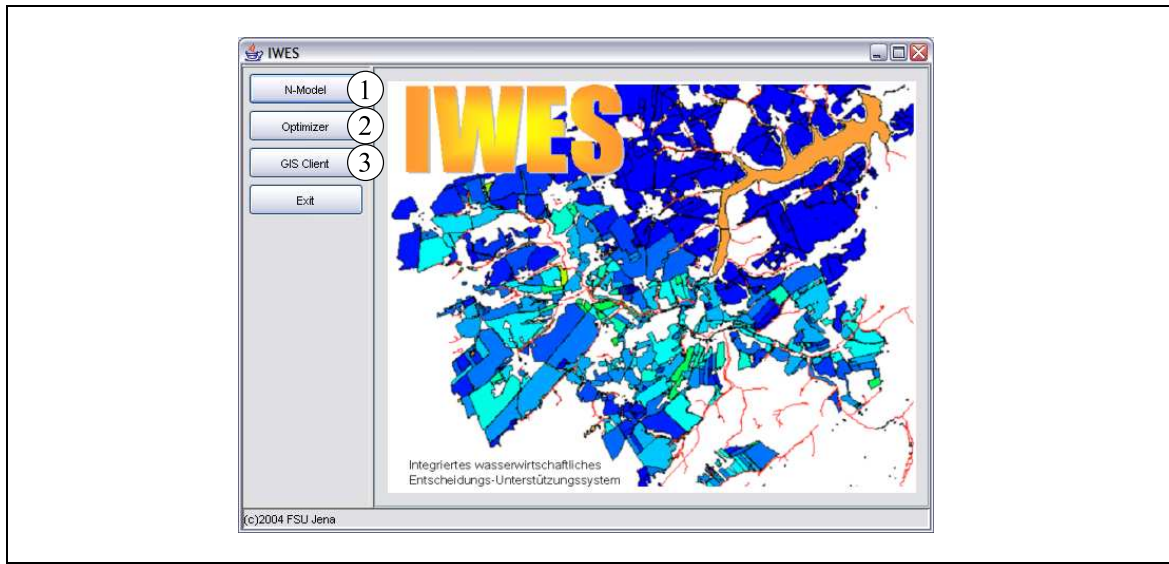


Abbildung 3.26: Startbildschirm des Entscheidungsunterstützungssystems IWES

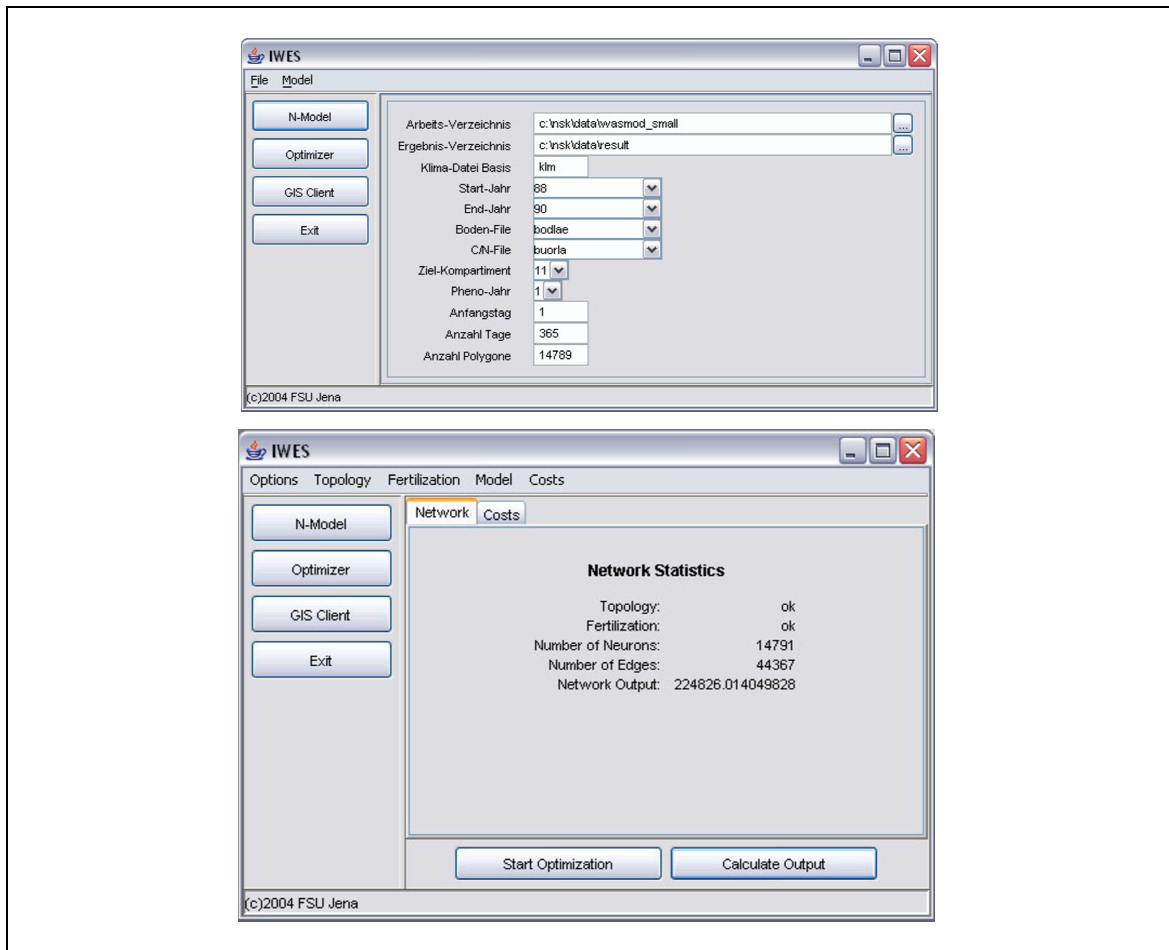


Abbildung 3.27: Grafische Oberflächen zum Zugriff auf WASMOD (oben) und HydroNet (unten)

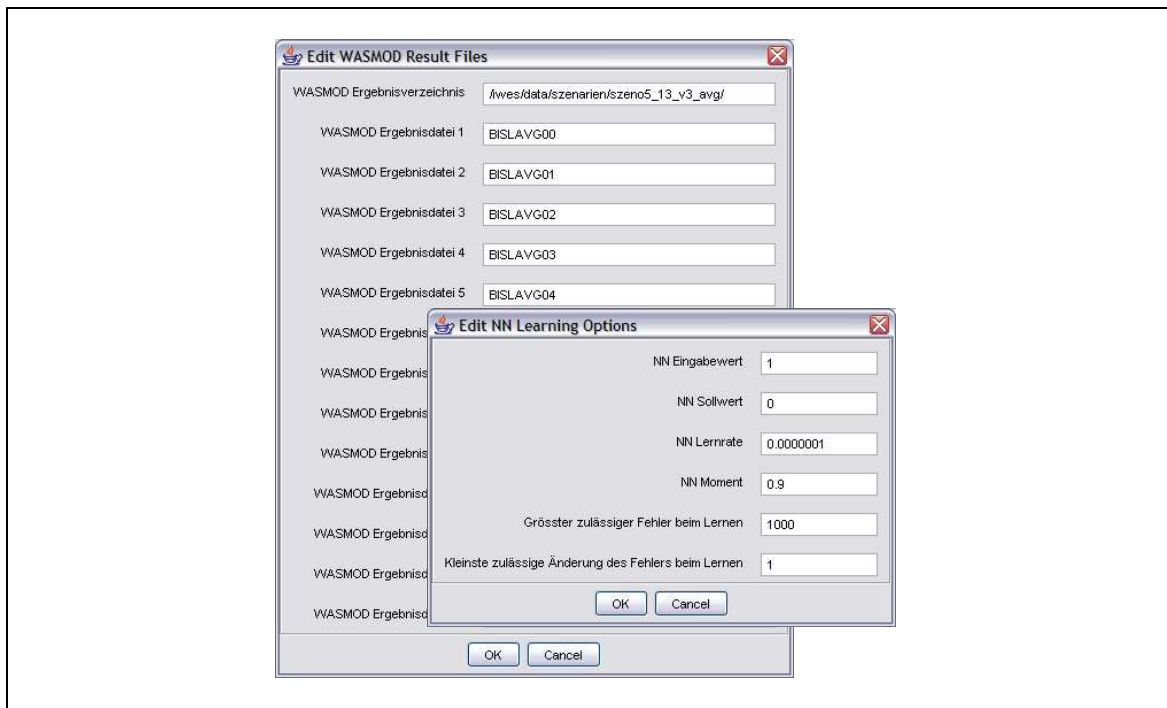


Abbildung 3.28: Dialogfenster zur Parametrisierung von HydroNet und BP*-Verfahren

Aktivierungsfunktionen vorgegeben (Abbildung 3.28) sowie die initialen Gewichte der Düngekannten spezifiziert werden.

Nach der Erzeugung des HydroNet ist zum einen die Berechnung seiner Netzwerkausgabe möglich. Zum anderen kann die Anpassung der Düngekanntengewichte mit den BP*-Verfahren erfolgen. Hierfür stehen Dialogfenster zur Definition der Lernparameter sowie der Abbruchbedingung des Verfahrens zur Verfügung (Abbildung 3.28). Für eine größtmögliche Reduktion der Netzwerkausgabe wird hier dem Parameter *NN-Sollwert* der Wert 0 zugewiesen. Über die übrigen Eingabefelder können auch alle anderen Parameter des BP*-Verfahrens editiert werden. Die grafische Oberfläche bietet die Möglichkeit, sämtliche Daten sowohl des HydroNet als auch des Lernverfahrens abzuspeichern. Als Datenformat wurden dabei XML-Dokumente (The World Wide Web Consortium 2000) verwendet.

Nach der Anpassung der Düngekanntengewichte durch das Lernverfahren können die Ergebnisse mit Hilfe eines grafischen GIS-Clients visualisiert werden (Abbildung 3.29). Zu diesem Zweck werden die Eigenschaften des HydroNet, welche zunächst auf der Basis räumlicher Modelleinheiten vorliegen, zusammengefasst und den assoziierten Nutzflächen als zusätzliche Eigenschaften hinzugefügt. Dafür können vom Benutzer einerseits die im GIS darzustellenden landwirtschaftlichen Nutzflächen und andererseits die Zuordnung zwischen Modelleinheiten und Nutzflächen vorgegeben werden. Im GIS-Client sind damit alle Nutzflächen mit den dazugehörigen Optimierungsergebnissen hinterlegt. Auf dieser Grundlage können die dargestellten Polygone klassifiziert und ihrer Klassenzugehörigkeit entsprechend eingefärbt werden. Eine visuelle Identifikation besonders sensitiv reagierender Nutzflächen wird somit möglich. Über einen Datenbank-Client können zudem weitere Eigenschaften der

Nutzflächen wie etwa Bewirtschaftungsform oder Größe eingesehen werden, die jedoch aus externen Datenquellen eingebunden werden müssen.

Über entsprechende Dialogfenster, welche den Nutzflächen im GIS zugeordnet sind, kann der Benutzer zudem auf deren assoziierte Neuronen zugreifen, deren Eigenschaften einsehen und zum Teil editieren. Zu diesen Eigenschaften gehören die aktuelle Aktivierung, die Aktivierungsfunktion, die Düngekantengewichte sowie in der Abflusskaskade nachfolgende Neuronen. Der Zugriff erfolgt hierbei direkt auf die Daten des HydroNet, so dass Modifikationen sich auf nachfolgende Arbeiten mit dem HydroNet direkt auswirken.

Für das genannte Anwendungsszenario ergeben sich somit vielfältige Möglichkeiten, ein HydroNet aus vorhandenen Daten zu erzeugen, die Düngekantengewichte mit Hilfe des BP*-Verfahrens zu optimieren und die Netzwerkeigenschaften in Interaktion mit dem GIS-Client manuell zu editieren. Eine externe Weiterverarbeitung der Ergebnisse ist durch vorhandene Schnittstellen jederzeit möglich. Mit IWES wird dem Benutzer somit ein Werkzeug in die Hand gegeben, das gezielt zur Entscheidungsunterstützung bei der Bearbeitung von Bewirtschaftungsfragestellungen eingesetzt werden kann.

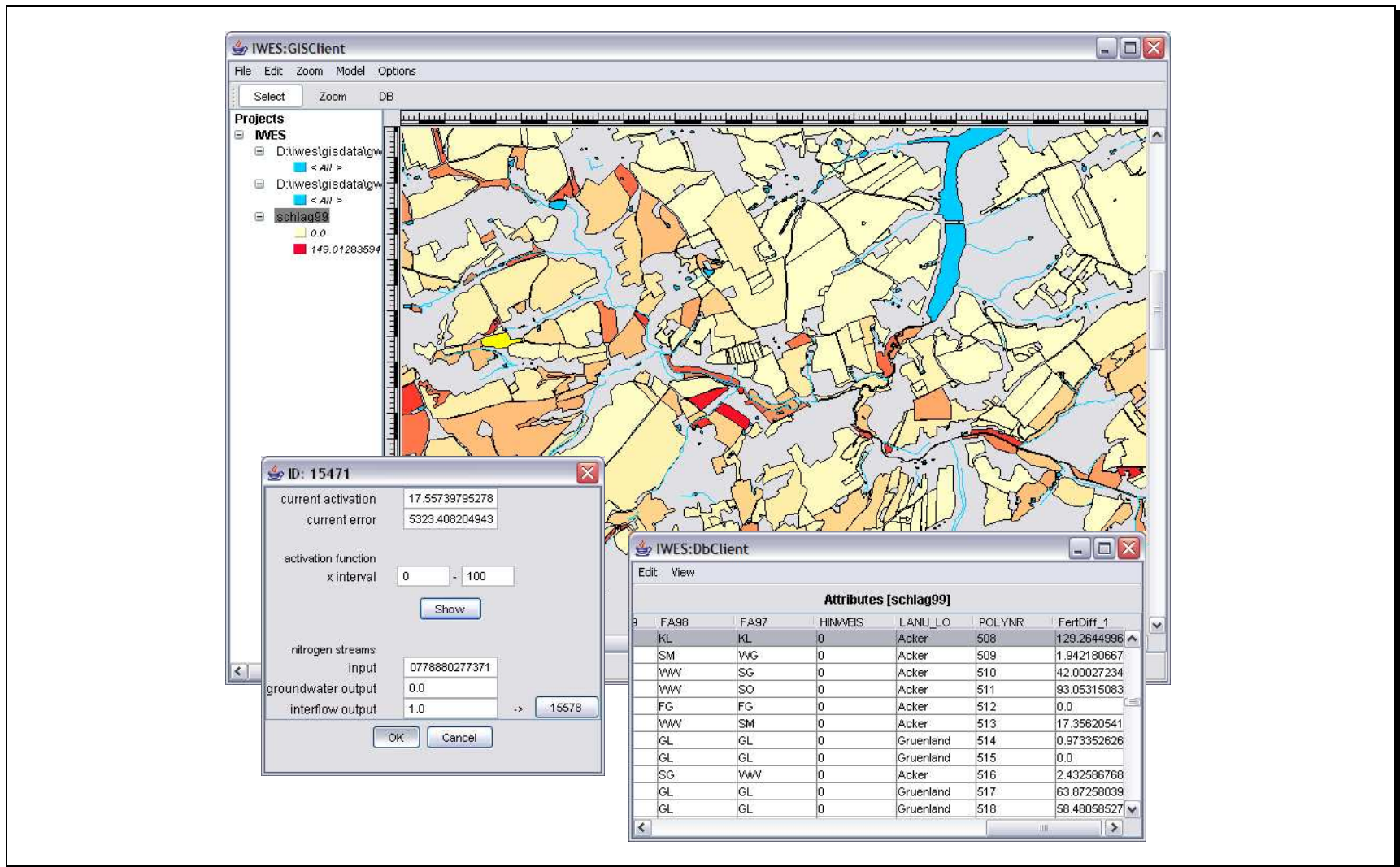


Abbildung 3.29: GIS-Client zur Auswertung der Netzwerk-Ergebnisse

4 Zusammenfassung und Ausblick

4.1 Zusammenfassung

Die Sicherung und nachhaltige Nutzung der Ressource Wasser stellt eine globale Problematik dar, die nur durch eine Vielzahl von Einzelanstrengungen auf lokaler bis regionaler Ebene gelöst werden kann. Hierbei gilt es, ein ausgewogenes Verhältnis zwischen der Berücksichtigung von Anforderungen an die Wasserqualität auf der einen und der Bewirtschaftung der zugehörigen Einzugsgebiete auf der anderen Seite zu finden. Aufgrund der großen Anzahl teils gegenläufiger Einflussfaktoren sowie der Komplexität der realweltlichen Systeme benötigen Entscheidungsträger Unterstützung bei der Entscheidungsfindung. Ein Hilfsmittel stellen dabei Entscheidungsunterstützungssysteme dar. Hinsichtlich der genannten Problematik sollten diese einerseits in der Lage sein, den jeweiligen Untersuchungsgegenstand adäquat abzubilden, als auch andererseits Werkzeuge zur gezielten Suche nach optimalen Bewirtschaftungsstrategien bereitzustellen.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit konnte gezeigt werden, dass es möglich ist, aufbauend auf einem hydrologischen Modell mit Hilfe neuronaler Netze eine optimierte Bewirtschaftung eines Talsperreneinzugsgebietes nach vorgegebenen Kriterien zu prognostizieren. Diese Kriterien umfassten neben einer Minimierung des Stickstoffaustrags als wesentlichen Indikator für die Wasserqualität auch wirtschaftliche Gesichtspunkte, da die Kosten zur Realisierung der Maßnahmen zur Austragsminderung ebenfalls in die Suche mit einbezogen wurden. Die Bewirtschaftung wurde hierbei durch den anthropogen verursachten N-Eintrag repräsentiert, da dieser aufgrund seiner engen Verknüpfung mit der Bewirtschaftung als Leitparameter fungieren kann. Bei der Suche nach optimalen Bewirtschaftungsszenarien für das betrachtete Einzugsgebiet ließen sich somit zwei Problemstellungen unterscheiden:

1. Bei gegebenen Kosten für Änderungen der N-Einträge auf den Einzelflächen soll der N-Gesamtautrag in den Vorfluter minimiert werden.
2. Bei vorgegebenem N-Gesamtautrag in den Vorfluter sollen die Kosten der dafür notwendigen Änderungen der N-Einträge auf den Einzelflächen minimiert werden.

Gelöst wurden diese Optimierungsprobleme durch den Einsatz eines neuartigen neuronalen Netzes (HydroNet), welches nicht auf dem bisher in der hydrologischen Modellierung verbreiteten Black-Box-Ansatz beruht. Wesentliche Voraussetzung einer Ausweisung optimaler N-Eintragsszenarien war die Abbildung topologischer Beziehungen zwischen den einzelnen Einheiten, da diese insbesondere in Form lateraler Stoffflüsse einen bedeutenden Einfluss auf die betrachteten Prozesse darstellen. Der entwickelte Ansatz beinhaltet daher die Repräsentation der vom zugrunde liegenden Modell berücksichtigten räumlichen Modelleinheiten als Neuronen eines Backpropagation-Netzes. Die individuellen

Beziehungen zwischen N-Eintrag und N-Austrag jeder Einheit wurden durch die Aktivierungsfunktionen der Neuronen dargestellt. Der laterale Stofftransport zwischen einzelnen Modelleinheiten, der vertikale Stickstoffabfluss von den Modelleinheiten ins Grundwasser sowie der externe N-Eintrag wurden jeweils durch Netzwerkkanten repräsentiert. Mit Hilfe eines modifizierten Backpropagation-Lernverfahrens konnten die Parameter des neuronalen Netzes so angepasst werden, dass das Ergebnis aus einer Optimierung der N-Einträge zur Lösung vorgegebener Problemstellungen bestand. Die prognostizierten Änderungen der N-Einträge dienten dabei nicht als direkte Handlungsempfehlungen für den Entscheidungsträger, sondern vielmehr als Sensitivitätsbeiwerte. Mit ihrer Hilfe konnte die Relevanz von Maßnahmen auf Einzelflächen zur Umsetzung der Zielvorgaben im Gesamtgebiet bewertet werden. Darauf aufbauend kann in der Praxis eine Maßnahmenkonzentration auf jene Teilgebiete erfolgen, die ein optimales Verhältnis zwischen Aufwand und Nutzen versprechen.

Im Zuge der Entwicklung des Lernverfahrens erfolgte auch eine Untersuchung seiner spezifischen Eigenschaften. Hierbei konnte formell nachgewiesen werden, dass das Ergebnis die Einhaltung einer oberen Grenze für den N-Gesamtaustrag sicherstellt, sofern eine solche Lösung existiert. Über das zweite Teilziel der Minimierung der dabei aufzuwendenden Kosten konnte hingegen kein allgemeiner Beweis geführt werden. Darüber hinaus erfolgte eine Analyse der Eigenschaften der durch die Aktivierungsfunktionen dargestellten Beziehungen. Zusammen mit möglichen Darstellungsformen wurde hierbei beschrieben, wie ihre Ableitung aus einem geeigneten Stofftransportmodell erfolgen kann. Im Ergebnis konnte festgestellt werden, dass sowohl Polynome als auch Polyline als Darstellungsformen der Aktivierungsfunktionen grundsätzlich geeignet sind. Betrachtungen zu den Vor- und Nachteilen beider Funktionstypen schlossen diesen Teil der Arbeit ab.

Im Anschluss an die Entwicklung des Optimierungsverfahrens erfolgte seine Anwendung am Beispiel des Talsperrensystems Weida-Zeulenroda, um hier das Problem des diffusen Stickstoffeintrags aus landwirtschaftlichen Nutzflächen in ein Trinkwasserreservoir zu bearbeiten. Die Darstellung der hydrologischen und chemischen Prozessdynamik im betrachteten Einzugsgebiet erfolgte unter Zuhilfenahme des bestehenden Stofftransportmodells WASMOD. Dieses diente einerseits als Quelle für die räumliche Diskretisierung des Gebietes und die topologischen Beziehungen zwischen den einzelnen Modelleinheiten. Andererseits konnten zuvor entwickelte N-Eintragsszenarien mit seiner Hilfe modelliert werden. Die resultierenden Stützstellen der für die einzelnen Modelleinheiten individuellen Beziehung zwischen N-Eintrag und N-Austrag bildeten hierbei die Grundlage für eine anschließende Ermittlung von Aktivierungsfunktionen des HydroNet.

Die Entwicklung der modellierten N-Eintragsszenarien erfolgte derart, dass die interessierende Bandbreite der für den N-Austrag relevanten Parameter möglichst vollständig abgedeckt wurde. Hierzu zählte neben der angebauten Fruchtart sowie deren jährlicher Variation vor allem die in Form von Düngung eingetragene N-Menge. Dabei erfolgte auf der Grundlage von Modelltests und Überlegungen zum angestrebten Prognosezeitraum die Auswahl eines zeitlichen Horizontes von fünf Jahren für die Szenarien. Diesem wurden repräsentative klimatische Verhältnisse zugeordnet. Die für die Modellierung herangezogenen Klimaparameter orientierten sich an einem repräsentativen, ebenfalls fünfjährigen Zeitraum. Aufbauend auf den Modellierungsergebnissen erfolgte ein praxisbezogener Vergleich der in der Theorie erarbeiteten Typen von Aktivierungsfunktionen. Hierbei bestätigte sich die Vermutung, dass Polyline vor allem hinsichtlich einer möglichst detailgetreuen Abbildung der Beziehung

zwischen N-Eintrag und N-Austrag einzelner räumlicher Modelleinheiten Vorteile gegenüber Polynomen aufweisen. Ein weiteres Ergebnis der Szenarienmodellierung bestand in der Erkenntnis, dass für die einzelnen Modelleinheiten ein konstantes, vom Szenario unabhängiges Verhältnis der Anteile von lateralen und vertikalen Stoffflüssen deutlich dominiert. Die Darstellung der Abflussanteile im HydroNet durch konstante, vom ermittelten N-Eintrag unabhängige Kantengewichte konnte damit gerechtfertigt werden.

Mit der nachfolgenden Anwendung des auf Basis der Modellergebnisse erzeugten HydroNet konnte gezeigt werden, dass ein neuronales Netz mit einer expliziten Repräsentation von räumlichen Modelleinheiten und topologischen Beziehungen in der Lage ist, die für die Problemlösung wesentlichen Stoffumsetzungs- und Stofftransportprozesse adäquat abzubilden. Hierfür wurden die von WASMOD berechneten N-Austräge aller Modelleinheiten den Aktivierungen der entsprechenden Neuronen des HydroNet gegenübergestellt.

Aufbauend auf die erfolgreiche Abbildung des Ist-Zustandes konnten die zur Optimierung der N-Einträge entwickelten Lernverfahren auf das HydroNet angewandt werden. Im Mittelpunkt der Betrachtungen stand hier die Gegenüberstellung der Verfahrensergebnisse für unterschiedliche Vorgaben des N-Gesamtaustrags (Problemstellung 2). Ziel des Vergleichs war die Beantwortung der Frage, inwieweit die Ausweisung sensibler Einheiten für verschiedene Vorgaben übereinstimmt. Hierbei zeigte sich, dass zwar Einheiten mit generell geringer Sensitivität ermittelt werden können, die Ausweisung hoch sensibler Flächen jedoch stets von der konkreten Problemstellung abhängig ist.

Um das Optimierungsverfahren zu validieren, wurden seine Ergebnisse zur Parametrisierung einer Modellierung auf der Grundlage von WASMOD herangezogen. Trotz der zum Teil starken Generalisierung der von WASMOD berücksichtigten Prozesse im HydroNet zeigten die Ergebnisse der Validierung eine sehr hohe Übereinstimmung. Im Mittelpunkt weiterer Untersuchungen stand der Einfluss unterschiedlicher klimatischer Verhältnisse auf die Ergebnisse der Optimierung am Beispiel der Niederschlagsmenge. Hierbei ergaben sich nur geringe Abweichungen in den Ergebnissen des Lernverfahrens.

Abschließend wurde das entwickelte Optimierungsverfahren mit zwei herkömmlichen Ansätzen verglichen, um seine Leistungsfähigkeit zu demonstrieren. Die Gegenüberstellung erfolgte anhand einer praxisnahen Aufgabenstellung, welche eine maximale Reduktion des N-Gesamtaustrags bei gegebenen Kosten zum Ziel hatte (Problemstellung 1). Auf diesem Wege konnte eine deutliche Überlegenheit des neuronalen Lösungsansatzes nachgewiesen werden. Die Ursache dafür liegt in der expliziten Berücksichtigung der hydrologischen Topologie des Einzugsgebietes sowie einer integrierten Betrachtung von N-Eintrag und N-Austrag. Auch wenn davon ausgegangen werden kann, dass in der Praxis eine Verbesserung der Vergleichsverfahren durch Hinzuziehen menschlicher Erfahrungen erzielt werden kann, ist aufgrund der Vielzahl zu berücksichtigender Parameter des betrachteten Einzugsgebietes eine Überlegenheit des neu entwickelten Verfahrens wahrscheinlich.

Die Implementierung des entwickelten Verfahrens beinhaltetete auch die Bereitstellung einer grafischen Benutzeroberfläche. Als Werkzeug zur Parametrisierung und Steuerung des Verfahrens sowie zur Visualisierung seiner Ergebnisse kann diese wertvolle Unterstützung bei der Identifizierung von Maßnahmeschwerpunkten im Gebiet leisten. Die Kombination aus Stofftransportmodell, Optimierungs-

verfahren und Benutzerschnittstelle bildet so ein Entscheidungsunterstützungssystem, welches in der Praxis als Instrument zur Bearbeitung von Problemen des diffusen N-Eintrags in ein Trinkwasserreservoir genutzt werden kann. Für eine vorgegebene Problemstellung kann somit die Wirksamkeit von N-Reduktionen auf Einzelflächen bei gleichzeitiger Minimierung des hierfür notwendigen Aufwandes ausgewiesen werden. Darauf aufbauend kann durch den Entscheidungsträger aus der Fülle möglicher N-reduzierender Maßnahmen diejenige ausgewählt werden, mit der sich auf der jeweiligen Nutzfläche eine Reduktion im vorgegebenen Umfang realisieren lässt.

Eine Gegenüberstellung der zu Beginn der Arbeit aufgestellten Thesen mit den hier präsentierten Ergebnissen zeigt, dass sämtliche getroffenen Annahmen bestätigt werden konnten. Die Gültigkeit der Thesen eins bis drei wurde hierbei zunächst durch die Entwicklung des HydroNet theoretisch und im anschließenden Anwendungsteil der Arbeit auch praktisch nachgewiesen. Die mit der These vier aufgestellte Behauptung, dass neuronale Netze auch zur Lösung von Bewirtschaftungsproblemen mit einer großen Anzahl von Einzelflächen sowie bei hohem Detaillierungsgrad der betrachteten Prozesse geeignet sind, ergibt sich aus den Eigenschaften der vorgestellten Verfahrensweise. Vor allem bei der Repräsentation der Prozesse definieren die zugrunde liegenden Modelle die Genauigkeit der Abbildung im HydroNet. Eine Abbildung von Stoffumsatz und Stofftransport im Einzugsgebiet durch das HydroNet kann daher höchstens so genau sein wie das Ausgangsmodell. Gleiches gilt für die Korrektheit des Optimierungsergebnisses. Die Gültigkeit der These fünf konnte schließlich durch den Vergleich des entwickelten Optimierungsverfahrens mit herkömmlichen Ansätzen bestätigt werden. Hierbei stand vor allem die Gegenüberstellung der Ergebnisse der Verfahren mit den dazu aufgewandten Kosten im Mittelpunkt. Die Dominanz des auf dem HydroNet basierenden Lösungsansatzes – und damit die Notwendigkeit der Berücksichtigung topologischer Beziehungen – konnte dabei nachgewiesen werden.

4.2 Ausblick

Das Management hydrologischer Einzugsgebiete mit ausgeprägtem Relief ist mit einer ganzen Reihe von Problemen behaftet, deren Lösung die Berücksichtigung hydrologischer Topologien erfordert. Phosphate zum Beispiel gelangen wie die in dieser Arbeit betrachteten Stickstoffverbindungen durch anthropogene Einträge in die Umwelt. Sie reichern sich aufgrund ihrer chemischen Eigenschaften im Boden an, können jedoch in Folge von Erosionsprozessen ausgespült und lateral abtransportiert werden. In Gewässern stellen sie insbesondere durch ihr Eutrophierungspotenzial einen Schadstoff dar, dessen Eintrag es zu minimieren gilt. Die Suche nach Teilflächen im Einzugsgebiet, die für Maßnahmen zur Reduktion von Phosphat-Austrägen ein besonders effizientes Kosten/Nutzen-Verhältnis aufweisen, sollte aufgrund der ähnlich gelagerten Struktur dieses Problemfeldes mit dem entwickelten Verfahren ebenfalls realisierbar sein.

Eine vergleichbare Situation kann auch bei der Planung von Maßnahmen zur Hochwasserprävention vorgefunden werden. Bei der Entstehung von Hochwassersituationen spielt neben anderen Faktoren der Oberflächenabfluss auf gesättigten Teilflächen eine wesentliche Rolle. Auch hier ist ein lateraler Abfluss über benachbarte Flächen bis in den Vorfluter möglich, ebenso wie seine Unterbrechung auf

Flächen mit hoher Retentionskapazität. Ein adaptiertes HydroNet könnte dabei für die Ausweisung von Einzelflächen herangezogen werden, auf denen Maßnahmen zur Erhöhung des Retentionsvermögens eine besondere Effizienz entfalten. Die Aktivierungsfunktionen müssten hier zur Darstellung der Retentionskapazität einzelner Teilflächen herangezogen werden, die in Anlehnung an das präsentierte Verfahren durch geeignete Abflussmodelle bereitgestellt werden könnten.

Die Gemeinsamkeit all dieser Ansätze besteht in der Darstellung von lokal auf einen betrachteten Problemstoff wirkenden Prozessen durch Aktivierungsfunktionen in einem neuronalen Netz. Ihre Ermittlung kann dabei mit Hilfe geeigneter Modelle über die Simulation von Szenarien erfolgen. Topologische Beziehungen zwischen Einzelflächen, wie sie häufig in Form lateraler Transportprozesse auftreten, können durch gerichtete Kanten nachgebildet werden. Gleiches gilt für Maßnahmen, die lokal auf Einzelflächen wirken. Der Umfang von Maßnahmen und lateralem Transport wird durch geeignete Kantengewichte dargestellt. Die Aggregation aller das Gebiet verlassenden Stoffflüsse erfolgt schließlich über die Netzwerkausgabe. In dem so konstruierten neuronalen Netz kann das vorgestellte Lernverfahren schließlich zur gezielten Anpassung von Maßnahmen repräsentierenden Kantengewichten herangezogen werden, um eine optimierte Verteilung der hierbei aufzuwendenden Mittel zu gewährleisten.

Literaturverzeichnis

- [Abbott u. a. 1986a] ABBOTT, M. B. ; BATHURST, J. C. ; CUNGE, J. A. ; O'CONNEL, P. E. ; RASMUSSEN, J.: An Introduction to the European Hydrological System - Systeme Hydrologique Europeen, SHE. 1: History and Philosophy of a Physically-Based Distributed Modelling System. In: *J. Hydrol.* 87 (1986), S. 45–59
- [Abbott u. a. 1986b] ABBOTT, M. B. ; BATHURST, J. C. ; CUNGE, J. A. ; O'CONNEL, P. E. ; RASMUSSEN, J.: An Introduction to the European Hydrological System - Systeme Hydrologique Europeen, SHE. 2: Structure of a Physically-Based Distributed Modelling System. In: *J. Hydrol.* 87 (1986), S. 61–77
- [Abrahart u. a. 1999] ABRAHART, R. J. ; SEE, L. ; KNEALE, P. E.: Applying saliency analysis to neural network rainfall-runoff modelling. In: *Proceedings of the 4th International Conference on Geocomputation, Fredericksburg, Virginia, USA, 25-28 July 1999*
- [Anderson und Burt 1985] ANDERSON, M. G. (Hrsg.) ; BURT, T. P. (Hrsg.): *Modelling strategies*. Kap. Hydrological Forecasting, S. 1–15. Chichester : Wiley & Sons, 1985
- [Arbeitsgemeinschaft Trinkwassertalsperren e. V. 2000] ARBEITSGEMEINSCHAFT TRINKWASSERTALSPERREN E. V.: *Erfahrungen und Empfehlungen zur Landwirtschaft in Einzugsgebieten von Trinkwassertalsperren*. Oldenburg Industrieverlag, 2000 (ATT-Schriftenreihe 9)
- [Bathurst 1986] BATHURST, J. C.: Physically-based distributed modelling of an upland catchment using the Systeme Hydrologique. In: *Europeen. J. Hydrol.* 87 (1986), S. 79–102
- [Bergström 1995] BERGSTRÖM, S.: *The HBV Model*. Kap. Computer Models of Watershed Hydrology, S. 443–476, Water Resources Publications, Highlands Ranch, 1995
- [Beven 1985] BEVEN, K. J.: *Distributed Models*. Kap. Hydrological forecasting, S. 405–435, Wiley & Sons, 1985
- [Beven 1989] BEVEN, K. J.: Changing ideas in hydrology ; the case of physically-based models. In: *Journal of Hydrology* 105 (1989), S. 157–172
- [Bonczek u. a. 1981] BONCZEK, R. H. ; HOLSAPPLE, C. W. ; WHINSTON, A.: *Foundations of Decision Support Systems*. Academic Press, 1981
- [Bosch u. a. 2001] BOSCH, D. ; THEURER, F. ; BINGNER, R. ; FELTON, G. ; CHAUBEY, I.: Evaluation of the AnnAGNPS Water Quality Model. In: PARSONS, J. E. (Hrsg.) ; THOMAS, D. L. (Hrsg.) ; HUFFMAN, R. L. (Hrsg.): *Agricultural Non-Point Source Water Quality Models: Their Use and*

- Application* Bd. 398. 2001, S. 45–54. – <http://www3.bae.ncsu.edu/Regional-Bulletins/Modeling-Bulletin/>
- [Bouraoui u. a. 2002] BOURAOUI, F. ; BRAUD, I. ; DILLAHA, T. A.: ANSWERS: A Nonpoint Source Pollution Model. In: SINGH, V. P. (Hrsg.) ; FREVERT, D. K. (Hrsg.): *Mathematical Models of Small Watershed Hydrology and Applications*. Chelsea, Colorado : Water Resources Publications, LLC, 2002, S. 833–882
- [Brans u. a. 1986] BRANS, J. P. ; VINCKE, P. ; MARESCHAL, B.: How to select and how to rank projects: The PROMETHEE method. In: *European Journal of Operational Research* (1986), Nr. 24, S. 228–238
- [Braun 1975] BRAUN, G.: Entwicklung eines physikalischen Wasserhaushaltsmodells für Lysimeter. In: *Mitteilungen Lichtenweiß Institut für Wasserbau der TU Braunschweig* 49 (1975), S. 1–38
- [Broomhead und Lowe 1988] BROOMHEAD, D. S. ; LOWE, D.: Multivariate functional interpolation and adaptive networks. In: *Complex Systems* 2 (1988), S. 321–355
- [Burnash 1995] BURNASH, R. J. C.: *The NWS river forecast system – catchment modelling*. Kap. Computer Models of Watershed Hydrology, S. 311–366, Water Resources Publications, 1995
- [Calver 1988] CALVER, A.: Calibration, sensitivity and validation of a physically-based rainfall-runoff model. In: *J. Hydrol.* 103 (1988), S. 103–115
- [Campolo u. a. 1999] CAMPOLO, M. ; ANDREUSSI, P. ; SOLDATI, A.: River flood forecasting with a neural network model. In: *Water Resources Research* 35 (1999), S. 1191–97
- [Chang und Hwang 1999] CHANG, F. ; HWANG, Y.: A self-organization algorithm for real-time flood forecast. In: *Hydrological Processes* 13 (1999), S. 123–38
- [Clair und Ehrmann 1996] CLAIR, T. A. ; EHRMANN, J. M.: Variations in discharge and dissolved organic carbon and nitrogen export from terrestrial basins with changes in climate: a neural network approach. In: *Limnology and Oceanography* 41 (1996), S. 921–27
- [Cohon 1978] COHON, Jared L.: *Multiobjective Programming and Planning*. New York : Academic Press, 1978
- [Colman und Davey 1999] COLMAN, A. ; DAVEY, M.: Prediction of summer temperature, rainfall and pressure in Europe from preceding winter north Atlantic Ocean temperature. In: *International Journal of Climatology* 19 (1999), S. 513–36
- [Crawford und Linsley 1966] CRAWFORD, N. H. ; LINSLEY, R. K.: Digital simulation in hydrology: Stanford Watershed Model IV. In: *Technical Report*. Stanford University : Department of Civil Engineering, 1966 (39)
- [Dahn u. a. 1999] DAHN, N. T. ; PHIEN, H. N. ; GUPTA, A. D.: Neural networks for river flow forecasting. In: *Water SA* 25 (1999), S. 33–39
- [David u. a. 2002] DAVID, O. ; MARKSTROM, S. L. ; ROJAS, K. W. ; AHUJA, L. R. ; SCHNEIDER, I. W.: The Object Modeling System. In: AHUJA, L. (Hrsg.) ; MA, L. (Hrsg.) ; HOWELL, T. A.

- (Hrsg.): *Agricultural System Models in Field Research and Technology Transfer*. Lewis Publishers, 2002, S. 317–31
- [Davis 1974] DAVIS, G.: *Management Information Systems: Conceptual Foundations, Structure, and Development*. New York : McGraw-Hill, 1974
- [Dawson u. a. 2000] DAWSON, C. W. ; BROWN, M. ; WILBY, R.: Inductive learning approaches to rainfall-runoff modelling. In: *International Journal of Neural Systems* 10 (2000), S. 43–57
- [Dawson und Wilby 2001] DAWSON, C. W. ; WILBY, R. L.: Hydrological modelling using artificial neural networks. In: *Progress in Physical Geography* 25 (2001), Nr. 1, S. 80–108
- [Densham 1991] DENSHAM, P. J.: Spatial Decision Support Systems. In: MAGUIRE, D. J. (Hrsg.) ; GOODCHILD, M. F. (Hrsg.) ; RHIND, D. W. (Hrsg.): *Geographical Information Systems: Principles and Applications* Bd. 1. London : Langman, 1991, S. 403–412
- [Densham und Goodchild 1989] DENSHAM, P. J. ; GOODCHILD, M. F.: Spatial decision support systems: A research agenda. In: *Proceedings GIS/LIS'89*. Orlando, FL., 1989, S. 707–716
- [Deutsche UNESCO-Kommission e.V. 2003] DEUTSCHE UNESCO-KOMMISSION E.V.: *Water for people, water for life: the United Nations world water development report – Executive Summary*. Bonn : UNO-Verlag GmbH, 2003. – zuerst veröffentlicht durch die United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization (UNESCO)
- [Dibbern u. a. 1996] DIBBERN, I. ; HEINRICH, U. ; KESSLER, M. ; REICHE, E.-W. ; ZÖLITZ-MÖLLER, R.: Erprobung der Berechnung von Einzugsgebietsgrenzen und der Gewässerkilometrierung auf der Basis des ATKIS-DLM 2511 und der Geländehöhendaten der Vermessungsverwaltung des Landes Schleswig-Holstein am Beispiel des Osteraugebietes unter Einsatz eines Geoinformationssystems / Projektzentrum Ökosystemforschung. Kiel, 1996. – Ergebnisbericht im Auftrag des MUNF-SH
- [Dillaha u. a. 2001] DILLAHA, T. A. ; WOLFE, M. L. ; SHIRMOHAMMADI, A. ; BYNE, F. W.: ANSWERS-2000. In: PARSONS, J. E. (Hrsg.) ; THOMAS, D. L. (Hrsg.) ; HUFFMAN, R. L. (Hrsg.): *Agricultural Non-Point Source Water Quality Models: Their Use and Application* Bd. 398, 2001, S. 28–44. – <http://www3.bae.ncsu.edu/Regional-Bulletins/Modeling-Bulletin/>
- [Ernstberger 1987] ERNSTBERGER, H.: *Einfluß der Landnutzung auf Verdunstung und Wasserbilanz: Bestimmung der aktuellen Evapotranspiration von unterschiedlich genutzten Standorten zur Ermittlung der Wasserbilanz von Einzugsgebieten in unteren Mittelgebirgslagen Hessens*. Gießen, Justus-Liebig-Universität, Fachbereich Geowissenschaften und Geographie, Dissertation, 1987
- [Europäische Union 2000] EUROPÄISCHE UNION: *Richtlinie 2000/60/EG des Europäischen Parlamentes und des Rates vom 22. Oktober 2000 zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik*. Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften, 2000
- [Fahlmann 1988] FAHLMANN, S. E.: Faster-learning variations on back-propagation: an empirical study. In: TOURETZKY, D. (Hrsg.) ; HINTON, G. E. (Hrsg.) ; SEJNOWSKI, T. J. (Hrsg.): *Pro-*

- ceedings of the 1988 Connectionist Models Summer School*. San Mateo : M. Kaufmann, 1988, S. 38–51
- [Fedra 1995] FEDRA, K.: Decision support for natural resources management: models, GIS, and expert systems. In: *All Applications* 3 (1995), Nr. 9, S. 3–19
- [Fedra 2002] FEDRA, K.: GIS and simulation models for Water Resources Management: A case study of the Kelantan River, Malaysia. In: *GIS Development* (2002), S. 39–43
- [Fedra und Jamieson 1996] FEDRA, K. ; JAMIESON, D. G.: An object-oriented approach to model integration: a river basin information system example. In: KOVAR, K. (Hrsg.) ; NACHTNEBEL, H.P. (Hrsg.): *IAHS Publ.*, 1996, S. 669–676
- [Fink 2004] FINK, M.: *Regionale Modellierung der Wasser- und Stickstoffdynamik als Entscheidungsunterstützung für die Reduktion des N-Eintrags am Beispiel des Trinkwassertalsperrensystems Weida-Zeulenroda, Thüringen*. Jena, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Institut für Geographie, Dissertation, 2004
- [Flügel 1995] FLÜGEL, W.-A.: Delineating Hydrological Response Units by Geographical Information System Analyses for Regional Hydrological Modelling using PRMS/MMS in the Drainage Basin of the River Bröl, Germany. In: *Hydrological Processes* 9 (1995), Nr. 3/4, S. 423–436
- [Flügel 1996] FLÜGEL, W.-A.: Hydrological response units (HRU's) as modelling entities for hydrological river basin simulation and their methodological Potenzial for modelling complex environmental process systems - Results from the Sieg catchment. In: *Die Erde* 127 (1996), S. 43–62
- [Flügel und Müschen 2001] FLÜGEL, W.-A. ; MÜSCHEN, B.: Applied Remote Sensing and GIS Integration for Model Parameterization (ARSGISIP) / FSU Jena, Institut für Geographie. 2001. – Final Report. <http://www.geogr.uni-jena.de/arsgisip/finalreport.html>
- [Franko u. a. 1997] FRANKO, U. ; OELSCHLÄGEL, B. ; SCHENK, S.: CANDY. In: BUNDESANSTALT FÜR GEWÄSSERKUNDE (Hrsg.): *Darstellung und Bewertung von mesoskaligen Stickstoffmodellen : Studie für den Forschungsverbund Elbe-Ökologie*. Berlin, 1997 (BfG-Mitteilung Band 3)
- [Freeze und Harlan 1969] FREEZE, R. A. ; HARLAN, R. L.: Blueprint for a physically-based digitally simulated hydrologic response model. In: *J. Hydrol.* 9 (1969), S. 237–258
- [Gallant 1993] GALLANT, S. I.: *Neural Network Learning and Expert Systems*. MIT Press, 1993
- [Gausemeier u. a. 1996] GAUSEMEIER, J. ; FINK, A. ; SCHLAKE, O.: *Szenario-Management: Planen und Führen mit Szenarien*. München u. a. : Hanser, 1996
- [Göbel 1997] GÖBEL, B.: *Messung und Modellierung des flächenhaften Wasser- und Stofftransports aus landwirtschaftlich genutzten Flächen auf zwei Maßstabsebenen unter besonderer Berücksichtigung der Bereitstellung bodenkundlicher Daten für die Modellrechnung*. Kiel, Christian-Albrechts-Universität, Ökologiezentrum, Dissertation, 1997. – EcoSys Beiträge zur Ökosystemforschung Supp. Band 19

- [Geoffrion 1983] GEOFFRION, A. M.: Can MS/OR Evolve Fast Enough? In: *Interfaces* 13 (1983), Februar, Nr. 1
- [Gerold u. a. 1997] GEROLD, G. ; CYKA, B. ; SUTMÖLLER, J. ; KRÜGER, J.-P. ; BUSCH, G.: Regionalization of Runoff Process through Aggregation of „Homogeneous Pedohydrotopes“ under GIS and SARA. In: *Int. Conference on Regionalization in Hydrology*. Braunschweig, 1997, S. 83–86
- [Goldberg 1989] GOLDBERG, D. E.: *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Reading, Mass. : Addison-Wesley, 1989
- [Grace 1976] GRACE, B. F.: Training Users of a Decision Support System / IBM Thomas J. Watson Research Laboratory. Mai 1976 (IBM Research Report RJ1790). – Forschungsbericht
- [Gray 1981] GRAY, P.: The SMU decision room project. In: *Transactions of the 1st International Conference on Decision Support Systems*. Atlanta, GA., 1981, S. 122–129
- [Green und Ampt 1911] GREEN, W. H. ; AMPT, G. A.: Studies on soil physics, I - Flow of Air and Water through soils. In: *J. Agric. Res.* 4 (1911), S. 1–24
- [Götze 1993] GÖTZE, U.: *Szenario-Technik in der strategischen Planung*. Wiesbaden : Wissenschaft und Praxis, 1993 (Schriftenreihe Unternehmensführung)
- [Hansen u. a. 1990] HANSEN, S. ; JENSEN, H. E. ; NIELSEN, N. E. ; SVENDSEN, H.: Daisy - A soil, plant, atmosphere system model / The national agency of environmental protection. Copenhagen, Denmark, 1990. – NPO-Research Report
- [Haude 1955] HAUDE, W.: Zur Bestimmung der Verdunstung auf möglichst einfache Weise. In: *Mitteilungen der deutschen Wetterdienstes* 2 (1955)
- [Hopfield 1982] HOPFIELD, J. J.: Neural Networks and Physical Systems with Emergent Collective Computational Abilities. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences*. USA, 1982, S. 2554–2558
- [Horn 1997] HORN, J.: F1.9: Multicriteria decision making. In: BÄCK, T. (Hrsg.) ; FOGEL, D. B. (Hrsg.) ; MICHALEWICZ, Z. (Hrsg.): *Handbook of Evolutionary Computation*. Bristol (UK) : Institute of Physics Publishing, 1997
- [Horton 1945] HORTON, R. E.: Erosional Development of Streams and their Drainage Basins: Hydrophysical Approach to Quantitative Morphology. In: *Bull. Geol. Soc. Am.* 56 (1945), S. 275–370
- [Hoynigen-Huene 1983] HOYNIGEN-HUENE, J. F. V.: Die Interzeption des Niederschlags in landwirtschaftlichen Pflanzenbeständen. In: *Schriftenreihe des Deutschen Verbandes für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V.* 57 (1983)
- [Huber 1982] HUBER, G. P.: Group decision support systems as aids in the use of structured group management techniques. In: *Transactions of the 2nd International Conference on Decision Support Systems*, 1982, S. 96–103

- [Huwe u. a. 1997] HUWE, B. ; SCHULZ, K. ; SCHILLINGER, M. P.: DYNAMIT. In: BUNDESANSTALT FÜR GEWÄSSERKUNDE (Hrsg.): *Darstellung und Bewertung von mesoskaligen Stickstoffmodellen: Studie für den Forschungsverbund Elbe-Ökologie*. Berlin, 1997 (BfG-Mitteilung Band 3)
- [Jayawardena und Fernando 1998] JAYAWARDENA, A. W. ; FERNANDO, D. A. K.: Use of the radial basis function type artificial neural networks for runoff simulation. In: *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering* 13 (1998), S. 91–99
- [Keen und Scott-Morton 1978] KEEN, P. G. W. ; SCOTT-MORTON, M. S.: *Decision support systems: an organizational perspective*. Reading : Addison-Wesley, 1978
- [Kersebaum und Richter 1997] KERSEBAUM, K. C. ; RICHTER, J.: HERMES. In: BUNDESANSTALT FÜR GEWÄSSERKUNDE (Hrsg.): *Darstellung und Bewertung von mesoskaligen Stickstoffmodellen : Studie für den Forschungsverbund Elbe-Ökologie*. Berlin, 1997 (BfG-Mitteilung Band 3)
- [Kersten und Michalowski 1996] KERSTEN, G. E. ; MICHALOWSKI, W.: The DSS Phenomenon: Design, Functions and Management Support. In: *International Conference on Decision Support Systems for Sustainable Development: Software Technology for Agenda 21*. Ottawa, 1996
- [Kite und Kouwen 1992] KITE, G. W. ; KOUWEN, N.: Watershed Modeling Using Land Classifications. In: *Water Resources Research* 28 (1992), Nr. 12, S. 3193–3200
- [Knowles 2002] KNOWLES, J. D.: *Local-Search and Hybrid Evolutionary Algorithms for Pareto Optimization*. Reading, UK, The University of Reading, Department of Computer Science, Dissertation, January 2002
- [Kralisch u. a. 2004] KRALISCH, S. ; KRAUSE, P. ; DAVID, O.: Using the Object Modeling System for hydrological model development and application. In: *Proceedings of the iEMSs 2004 International Environmental Modelling and Software Society (Veranst.)*, 2004
- [Laumanns u. a. 2002] LAUMANNs, M. ; THIELE, L. ; ZITZLER, E. ; WELZL, E. ; DEB, K.: Running time analysis of multi-objective evolutionary algorithms on a simple discrete optimization problem. In: *Parallel Problem Solving From Nature* (2002), S. 44–53
- [Lewis 2000] LEWIS, B.: *Linear Algebra Algorithms*. URL: <http://www.mcs.kent.edu/~blewis.2000>. – Stand 2000
- [Liang 1999] LIANG, S.: *The Java Native Interface: Programmer's Guide and Specification*. Addison Wesley Longman, Inc., June 1999
- [Looijen u. a. 1996] LOOIJEN, J. ; PELESIKOTI, N. ; STALJANSSENS, M.: ICOMIS: a spatial multi-objective decision-support system for coastal resource management. In: *ITC Journal* (1996), Nr. 3, S. 202–16
- [Magoulas u. a. 1997] MAGOULAS, G. D. ; VRAHATIS, M. N. ; ANDROULAKIS, G. S.: Effective backpropagation training with variable stepsize. In: *Neural Networks* 10 (1997), S. 69–82

- [Maier und Dandy 1996] MAIER, H. R. ; DANDY, G. C.: The use of artificial neural networks for the prediction of water quality parameters. In: *Water Resources Research* 32 (1996), S. 1013–22
- [Malczewski 1997] MALCZEWSKI, J.: *Spatial Decision Support Systems*. NCGIA Core Curriculum in GIScience, <http://www.ncgia.ucsb.edu/giscc/units/u127/u127.html>. 1997. – Stand October 6, 1998
- [Malczewski 1998] MALCZEWSKI, J.: Spatial Multicriteria Decision Analysis. In: THILL, J.C. (Hrsg.): *Multicriteria Decision-making and Analysis: A Geographic Information Sciences Approach*. New York : Ashgate, 1998
- [Mason u. a. 1996] MASON, J. C. ; TEMME, A. ; PRICE, R. K.: A neural network model of rainfall-runoff using radial basis functions. In: *Journal of Hydraulic Research* 34 (1996), S. 537–48
- [McCulloch und Pitts 1943] MCCULLOCH, W. ; PITTS, W.: A Logical Calculus of the Ideas Immanent in Nervous Activity. In: *Bulletin of Mathematical Biophysics* 7 (1943), S. 115–133
- [Meijerink 1997] MEIJERINK, A. M. J.: *Conceptual Modelling for Surface-Groundwater Interactions Based on Hydrotopes, Identified by Remote Sensing*. Kap. Remote Sensing and Geographic Information Systems for Design and Operation of Water Resources Systems, S. 149–156, IAHS Publication, 1997
- [Meyer und Tesmer 2000] MEYER, T. ; TESMER, M.: Die flächendifferenzierte Berechnung der Grundwasserneubildungsrate mit einem GIS. Ein Verfahrensvergleich im mesoskaligen Maßstab. In: HERBERT, M. (Hrsg.) ; ISENBECK-SCHRÖTER, M. (Hrsg.) ; SCHOLZ, Ch. (Hrsg.): *HydroGeoEvent 2000, Wasser-Gesteins-Wechselwirkungen, Kurzfassungen* Bd. 12, 2000
- [Meyer-Schönherr 1992] MEYER-SCHÖNHERR, M.: *Schriftenreihe Unternehmensführung*. Bd. 7: *Szenario-Technik als Instrument der strategischen Planung*. Ludwigsburg : Wissenschaft und Praxis, 1992
- [Minsky und Papert 1969] MINSKY, M. L. ; PAPERT, S. A.: *Perceptrons*. Cambridge : MIT Press, 1969
- [Nash 1957] NASH, J. E.: The Form of Instantaneous Unit Hydrograph. In: *General Assembly of Toronto* Bd. III: Surface Water, Prevision, Evaporation. Toronto : IAHS Publ., 1957
- [Nash und Sutcliffe 1970] NASH, J. E. ; SUTCLIFFE, J. V.: River flow forecasting through conceptual models. Part I: A discussion on principles. In: *J. Hydrol.* 10 (1970), S. 282–290
- [Nauck u. a. 1996] NAUCK, D. ; KLAWONN, F. ; KRUSE, R.: *Neuronale Netze und Fuzzy-Systeme*. Braunschweig, Wiesbaden : Vieweg Verlag, 1996
- [Naylor 1982] NAYLOR, T. H.: Decision Support Systems or Whatever Happened to MIS? In: *Interfaces* 4 (1982), Nr. 12, S. 92–94
- [Ostrowski 1997] OSTROWSKI, M. W.: *Improving sustainability of water resources systems using the group decision support system STEEL-GDSS*. http://www.tu-darmstadt.de/fb/bi/wb/ihwb/Mitarbeiter/ostrowski/steel_ds/steeldssintroductorypaper.html. 1997

- [Osyczka 1985] OSYCZKA, A.: Multicriteria optimization for engineering design. In: GERO, J. S. (Hrsg.): *Design Optimization*. Academic Press, 1985, S. 193–227
- [Pareto 1896] PARETO, V.: *Cours D'Economie Politique*. Bd. vol. I and II. Lausanne : F. Rouge, 1896
- [Parsons 2002] PARSONS, J.: Agland Decision Tool: A Multiobjective Decision Support System for Agricultural Property. In: *Proceedings of the iEMSs 2002* Bd. 3. Lugano, Switzerland, 2002, S. 181–186
- [Penman 1948] PENMAN, H. L.: Natural Evaporation from Open Water, Bare Soil and Grass. In: *Proc. Roy. Soc.* A193 (1948), S. 120–146
- [Philips 1954] PHILIPS, J. R.: An Infiltration Equation with Physical Significance. In: *Soil Sci.* 77 (1954), S. 153–175
- [Poff u. a. 1996] POFF, N. L. ; TOKAR, S. ; JOHNSON, P.: Stream hydrological and ecological responses to climate change assessed with an artificial neural network. In: *Limnology and Oceanography* 41 (1996), S. 857–63
- [Powell 1985] POWELL, M. J. D.: Radial Basis Functions for Multi-variable Interpolation: A Review. In: *IMA Conference on Algorithms for the Approximation of Functions and Data*. Shrivensham, England, 1985 (RMCS)
- [Power 2002] POWER, D. J.: *Decision Support Systems: Concepts and Resources for Managers*. Greenwood Publishing, 2002
- [Rahman 1998] RAHMAN, M. A.: *A Participatory DSS to Incorporate Local Knowledge for Resource and Environmental Management in Developing Countries*. Canada, Department of Geography, Faculty of Environmental Studies, University of Waterloo, Dissertation, 1998
- [Rau u. a. 1995] RAU, D. ; SCHRAMM, H. ; WUNDERLICH, J.: Die Leitbodenformen Thüringens. In: *Geowissenschaftliche Mitteilungen von Thüringen* Beiheft 3 (1995)
- [Refsgaard 1996] REFSGAARD, J. C.: Terminology, Modelling Protocol and Classification of Hydrological Model Codes. In: *Water Science Library* 22 (1996), S. 17–39
- [Reiche 1991] REICHE, E.-W.: *Entwicklung, Validierung und Anwendung eines Modellsystems zur Beschreibung und flächenhaften Bilanzierung der Wasser- und Stickstoffdynamik in Böden*. Kiel, Christian-Albrechts-Universität, Mathematisch-naturwissenschaftliche Fakultät, Dissertation, 1991. – Kieler Geographische Schriften 79
- [Reiche 1994] REICHE, E.-W.: Modelling water and nitrogen dynamics on catchment scale. In: *Ecological Modelling* 75/76 (1994), S. 371–384
- [Reiche 1995] REICHE, E.-W.: WASMOD: Teilmodell eines gebietsbezogenen Simulationssystems zur Erstellung von regionalen Wasser- und Stoffbilanzen. In: *Berichte des Forschungszentrums Waldökosysteme* B42 (1995), S. 85–100

- [Reiche 1996] REICHE, E.-W.: WASMOD – Ein Modellsystem zur gebietsbezogenen Simulation von Wasser- und Stoffflüssen, Darstellung des aktuellen Entwicklungsstandes. In: BRECKLING, B. (Hrsg.) ; ASSHOFF, M. (Hrsg.): *Modellbildung und Simulation im Projektzentrum Ökosystemforschung, Ökosysteme und ökologische Prozesse im Bereich der Bornhöveder Seenkette*. Kiel, 1996 (EcoSys). – <http://www.pz-oekosys.uni-kiel.de/ernst/wasmod/wasmod.html>
- [Reiche u. a. 1999] REICHE, E.-W. ; MEYER, M. ; DIBBERN, I.: Modelle als Bestandteile von Umweltinformationssystemen dargestellt am Beispiel des Methodenpaketes „DILAMO“. In: BLASCHKE, T. (Hrsg.): *Umweltmonitoring und Umweltmodellierung. GIS und Fernerkundung als Werkzeuge einer nachhaltigen Entwicklung*. Heidelberg : H. Wichmann Verlag, 1999
- [Richards u. a. 1956] RICHARDS, L. A. ; GARDNER, W. R. ; OGATA, G.: Physical Processes Determining Water Losses from Soil. In: *Soil Sci. Soc. Am. Proc.* 20 (1956), S. 310–314
- [Rischmüller 1980] RISCHMÜLLER, G.: Die multi-attributive Nutzentheorie: Ein Entscheidungshilfungsverfahren bei mehrfacher Zielsetzung. In: *Zeitschrift für betriebswirtschaftliche Forschung* 22 (1980), S. 498–518
- [Roy 1978] ROY, B.: ELECTRE III : Un algorithme de classements fondé sur une représentation floue des préférences en présence de critères multiples. In: *Cahiers du CERO* 20 (1978), Nr. 1, S. 3–24
- [Rumelhart u. a. 1986] RUMELHART, D. ; HINTON, E. ; WILLIAMS, E.: Learning Internal Representation by Error Propagation. In: MCLELLAND, J. (Hrsg.) ; RUMELHART, D. (Hrsg.): *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition*. Cambridge : MIT Press, 1986, S. 318–362
- [Saaty 1980] SAATY, T. L.: *The Analytic Hierarchy Process*. New York, NY : McGraw-Hill, 1980
- [Schaffer 1985] SCHAFFER, J. D.: Multiple objective optimization with vector evaluated genetic algorithms. In: GREFENSTETTE, J. J. (Hrsg.): *Proceedings of an International Conference on Genetic Algorithms and Their Applications*, 1985
- [Schulla 1997] SCHULLA, J.: *Hydrologische Modellierung von Flussgebieten zur Abschätzung der Folgen von Klimaänderungen*. Zürich : ETH Zürich, 1997 (Zürcher Geographische Schriften 69)
- [Schultze 1955] SCHULTZE, J. H.: *Die naturbedingten Landschaften der Deutschen Demokratischen Republik*. Gotha : Geographisch-Kartographische Anstalt, 1955
- [See und Openshaw 1999] SEE, L. ; OPENSHAW, L.: Applying soft computing approaches to river level forecasting. In: *Hydrological Sciences Journal* 44 (1999), S. 763–78
- [Sherman 1932] SHERMAN, L. K.: Streamflow from rainfall by a unit hydrograph method. In: *Eng. News Record* 108 (1932), S. 501–505
- [Simon 1960] SIMON, H. A.: *The new science of management decision*. New York : Harper & Row, 1960

- [Singh 1995] SINGH, V. P.: *Computer Models of Watershed Hydrology*. Water Resources Publications, 1995. – ISBN 0-918334-91-8
- [Smith und Eli 1995] SMITH, J. ; ELI, N.: Neural-network models of rainfall-runoff process. In: *Journal of Water Resources Planning and Management* 121 (1995), S. 499–508
- [Sprague und Carlson 1982] SPRAGUE, R. H. ; CARLSON, E. D.: *Building Effective Decision Support Systems*. Englewood Cliffs, N.J. : Prentice-Hall, 1982
- [Sprague und Watson 1996] SPRAGUE, R. H. ; WATSON, H. J.: *Decision support for management*. Upper Saddle River, N.J. : Prentice Hall, 1996
- [Staudenrausch 2001] STAUDENRAUSCH, H.: *Untersuchungen zur hydrologischen Topologie von Landschaftsobjekten für die distributive Flussgebietsmodellierung*. Jena, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Institut für Geographie, Dissertation, 2001
- [Stöcker 1993] STÖCKER, H. (Hrsg.): *Taschenbuch mathematischer Formeln und moderner Verfahren*. 2. Frankfurt am Main : Verlag Harry Deutsch, 1993
- [SUN Microsystems 2003] SUN MICROSYSTEMS: *Java 2 Platform, Standard Edition 1.4.1*. URL: <http://java.sun.com/j2se/1.4.1/index.jsp>. 2003. – Stand: 04.01.2004
- [The World Wide Web Consortium 2000] THE WORLD WIDE WEB CONSORTIUM: *Extensible Markup Language (XML) 1.0 (Second Edition)*. <http://www.w3.org/TR/2000/REC-xml-20001006>. 6 October 2000
- [Thiel 2000] THIEL, C.: *Vergleichende hydrologische Modellierung zweier Flusseinzugsgebiete unterschiedlicher Hydrodynamik (Zeulenroda, Thüringen und Mulargia, Sardinien) mit dem Modellsystem MMS/PRMS unter integrativer Verwendung von Geoinformationssystemen und Fernerkundungsdaten*. Jena, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Institut für Geographie, Diplomarbeit, 2000
- [Thirumalaiah und Deo 1998] THIRUMALAIAH, K. ; DEO, M. C.: Real-time flood forecasting using neural networks. In: *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering* 3 (1998), S. 26–32
- [Thres u. a. 1998] THRES, P. ; TOTSCHKE, K. U. ; HUWE, B.: Simulation der Stickstoffdynamik im Einzugsgebiet des Trinkwassertalsperrensystems Weida/Zeulenroda / Universität Bayreuth Lehrstuhl für Bodenkunde und Bodengeographie. 1998. – Forschungsbericht
- [Tokar und Johnson 1999] TOKAR, S. A. ; JOHNSON, P. A.: Rainfall-runoff modelling using artificial neural networks. In: *Journal of Hydrologic Engineering* 4 (1999), S. 232–39
- [Tuoff und Hiltz 1982] TUOFF, M. ; HILTZ, S. R.: Computer support for group versus individual decisions. In: *IEEE Trans. Communications* Bd. 1, 1982, S. 82–90
- [UNESCO 2003] UNESCO: *Water for people, water for life: the United Nations world water development report*. Paris : United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization (UNESCO), 2003. – launched on World Water Day (2003, March 22nd) at the Third World Water Forum in Kyoto, Japan

- [United Nations 1992] UNITED NATIONS: Agenda 21: Programme of action for sustainable development. In: *United Nations Conference on Environment and Development (UNCED)*. Rio de Janeiro, Brazil : UN Department of Public Information, New York, 3 - 14 June 1992
- [United Nations 2000] UNITED NATIONS: *Millennium declaration of United Nations*. UN Department of Public Information, New York, 2000. – Resolution A/RES/55/2
- [United Nations 2002] UNITED NATIONS: Johannesburg Declaration on Sustainable Development and plan of implementation of the World Summit on Sustainable Development. In: *World Summit on Sustainable Development*. Johannesburg, South Africa : UN Department of Public Information, New York, 26 August - 4 September 2002
- [van Veldhuizen und Lamont 2000] VELDHUIZEN, D. A. van ; LAMONT, G. B.: Multiobjective Evolutionary Algorithms: Analyzing the State-of-the-Art. In: *Evolutionary Computation* 8 (2000), Nr. 2, S. 125–147
- [Vemuri und Cedeño 1996] VEMURI, V. R. ; CEDEÑO, W.: A New Genetic Algorithm for Multi Objective Optimization in Water Resource Management. In: *Proceedings of the Second IEEE International Conference on Evolutionary Computation*. Piscataway, New Jersey : IEEE Press, 1996, S. 495–500
- [Wagenbreth und Steiner 1990] WAGENBRETH, O. ; STEINER, W.: *Geologische Streifzüge : Landschaft und Erdgeschichte zwischen Kap Arkona und Fichtelberg*. Leipzig : Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 1990
- [Walrath u. a. 2004] WALRATH, K. ; CAMPIONE, M. ; HUML, A. ; ZAKHOUR, S.: *The JFC Swing Tutorial Second Edition*. Addison-Wesley, February 2004
- [Wendling u. a. 1991] WENDLING, U. ; SCHELLIN, H.-G. ; THOMÄ, M.: Bereitstellung von täglichen Informationen zum Wasserhaushalt des Bodens für die Zwecke der agrarmeteorologischen Beratung. In: *Zeitschrift für Meteorologie* 41 (1991), S. 468–475
- [Yang 1997] YANG, R.: *Application of neural networks and genetic algorithms to modeling flood discharges and urban water quality*, University of Manchester, unpublished PhD thesis, 1997
- [Zagona u. a. 2001] ZAGONA, E. A. ; FULP, T. J. ; SHANE, R. ; MAGEE, T. ; GORANFLO, H. M.: RiverWare: A Generalized Tool for Complex Reservoir Systems Modeling. In: *Journal of the American Water Resources Association* (2001)
- [Zealand u. a. 1999] ZEALAND, C. M. ; BURNS, D. H. ; SIMONOVIC, S. P.: Short term streamflow forecasting using artificial neural networks. In: *Journal of Hydrology* 214 (1999), S. 32–48
- [Zell 1997] ZELL, A.: *Simulation neuronaler Netze*. München : Oldenbourg Verlag, 1997
- [Zitzler 1999] ZITZLER, E.: *Evolutionary Algorithms for Multiobjective Optimization: Methods and Applications*, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Dissertation, 1999